

**Titre:** Prise en compte des calculs de cœur via l'utilisation de DONJON5  
**Title:** pour le code de scénario nucléaire CLASS et évaluation de l'impact  
sur les inventaires isotopiques

**Auteur:** Martin Guillet  
**Author:**

**Date:** 2019

**Type:** Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis

**Référence:** Guillet, M. (2019). Prise en compte des calculs de cœur via l'utilisation de  
DONJON5 pour le code de scénario nucléaire CLASS et évaluation de l'impact sur  
**Citation:** les inventaires isotopiques [Mémoire de maîtrise, Polytechnique Montréal].  
PolyPublie. <https://publications.polymtl.ca/3937/>

 **Document en libre accès dans PolyPublie**  
Open Access document in PolyPublie

**URL de PolyPublie:**  
**PolyPublie URL:** <https://publications.polymtl.ca/3937/>

**Directeurs de  
recherche:** Guy Marleau, & Xavier Doligez  
**Advisors:**

**Programme:** Génie énergétique  
**Program:**

**POLYTECHNIQUE MONTRÉAL**

affiliée à l'Université de Montréal

**Prise en compte des calculs de cœur via l'utilisation de DONJON5 pour le code  
de scénario nucléaire CLASS et évaluation de l'impact sur les inventaires  
isotopiques**

**MARTIN GUILLET**

Département de génie physique

Mémoire présenté en vue de l'obtention du diplôme de *Maîtrise ès sciences appliquées*  
Génie énergétique

Juillet 2019

**POLYTECHNIQUE MONTRÉAL**

affiliée à l'Université de Montréal

Ce mémoire intitulé :

**Prise en compte des calculs de cœur via l'utilisation de DONJON5 pour le code  
de scénario nucléaire CLASS et évaluation de l'impact sur les inventaires  
isotopiques**

présenté par **Martin GUILLET**

en vue de l'obtention du diplôme de *Maîtrise ès sciences appliquées*

a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de :

**Alain HÉBERT**, président

**Guy MARLEAU**, membre et directeur de recherche

**Xavier DOLIGEZ**, membre et codirecteur de recherche

**Adrien BIDAUD**, membre externe

## DÉDICACE

*À mes parents, mes sœurs et mes amis de France et d'Amérique,*



## REMERCIEMENTS

Je tiens à remercier en tout premier lieu Guy Marleau qui a été un directeur de recherche des plus bienveillants et dont la qualité des conseils, l’accessibilité et la bienveillance sont sans égales.

Je souhaite remercier chaleureusement Xavier Doligez qui a accepté de co-encadrer cette maîtrise, qui n’a pas compté les heures et sans qui le travail présenté dans ce document ne serait pas comparable.

Je remercie Alain Hébert et Adrien Bidaud d’avoir accepté d’être membres du jury d’examen de cette maîtrise de recherche en qualité respective de président et membre.

Je remercie également les équipes de l’institut de génie nucléaire de polytechnique Montréal et notamment mesdames Lyne Dénommé et Joanne Sirois ainsi que le groupe PACS de l’IPNO et en particulier Marc Ernoult pour ses coups de main réguliers, Sandra Bouneau pour son humeur légendaire, Claire Le Naour pour sa bienveillance, Léa Tillard à laquelle j’ai régulièrement volé les espaces de calcul disponibles et Mélody Maloubier qui nous à régulièrement régales.

Je tiens à remercier tout particulièrement Frank Carré et Sylvain David dont les enseignements m’ont poussé à opter pour ce domaine scientifiquement passionnant qu’est la physique des réacteurs nucléaires. Je les remercie pour m’avoir encouragé à effectuer cette maîtrise recherche et pour les recommandations qui m’ont permis d’effectuer un stage passionnant à Argonne National Laboratory qui fût une excellente introduction aux codes de scénarios avant de suggérer la collaboration franco-québécoise qui est l’objet de ce mémoire.

Je tiens à remercier extrêmement chaleureusement Hadrien Leroyer, dont les conseils d’ancien ont été, sont (et très probablement seront) très précieux pour moi. J’ai hâte de commencer le prochain chapitre de ma vie professionnelle en tant que collègue.

Je remercie tout particulièrement les amis et camarades du bureau : Erwan Desmots pour son amitié et l’implication dans les projets communs, Kévin Fröhlicher présent au début et à la fin avec qui tant a été partagé, Vivian Salino et Atyab Calloo pour leurs précieux conseils ainsi que Guillaume Dupré et Maxime Paradis pour avoir permis de maintenir à nous trois une émulation positive en particulier au cœur de l’automne.

Je tiens à saluer l’équipe des stagiaires de la saison estivale 2018, Lucas Fede, Clément Gazon et Amandin Paquet avec qui ce fût un immense plaisir que de passer la totalité d’un été.

Je veux remercier mes amis de France pour leur soutien indéfectible pendant ces années

d'expatriation, leur accueil toujours aussi chaleureux à chaque retour, leur disponibilité lors de mes passages éclairs et les efforts pour me faire partager les divers moments pour lesquels je n'ai pu répondre présent.

Je souhaite pour finir remercier ma famille qui a toujours approuvé mes choix scolaires, personnels et maintenant professionnels bien que cela conduise à m'éloigner pendant plusieurs années et en particulier mes parents ; Claude Guillet et Magali Guillet, mes soeurs ; Lisa Guillet et Agathe Guillet et mes grands-mères Josette Paquier et Raymonde Guillet.

## RÉSUMÉ

Les codes de scénarios nucléaires sont destinés à donner une visibilité sur les inventaires radiotoxiques, la consommation de ressources et la quantité de matière disponible pour le recyclage en fonction des options technologiques, du nombre de réacteurs opérationnels et de leurs conditions d'opération. Ces codes nécessitent de modéliser les éléments du cycle et leurs interactions, de l'unité fabrication du combustible à celle de retraitement en passant par les réacteurs. La simulation de la physique d'un réacteur nucléaire nécessite de résoudre l'équation du transport des neutrons, opération complexe et extrêmement coûteuse, qui n'est en général pas effectué à l'échelle cœur et, a fortiori, pas plus dans les codes de scénarios où plusieurs centaines de cycles sont simulés. Néanmoins, c'est à cette échelle que les phénomènes de fuites neutroniques et d'hétérogénéités prennent toute leur importance.

L'objet de ce travail est de quantifier l'impact des calculs de cœurs à l'échelle du scénario. Une étude comparative est menée sur le code de scénario CLASS. D'une part, des simulations sont réalisées en utilisant des réseaux de neurones qui, à partir de calculs de réseaux infinis, permettent de s'extraire de l'échelle cœur tout en permettant de traiter des combustibles à priori inconnus. D'autre part, sont établis des modèles de réacteurs pour le code de scénario, qui font explicitement appel à des calculs de cœurs en 3D dans l'approximation de la diffusion avec le code DONJON5. Ces derniers nécessitent la création préalable d'un objet dans lequel est stocké l'ensemble des données nucléaires issues d'un calcul de réseau DRAGON5. L'établissement des schémas de calculs de réseau et de cœur a nécessité des simplifications et des optimisations poussées afin d'assurer la création d'une base de données contenant les résultats de milliers de calculs assemblage et des calculs de cœurs suffisamment rapides pour assurer des temps de calcul des scénarios raisonnables.

Le défi principal de ce projet a été d'inclure les combustibles MOx. En effet, afin de prendre correctement en compte la physique de ce type de combustible, le calcul en diffusion requiert l'interpolation des différents paramètres sur une grille à huit dimensions (burnup, enrichissement, concentration de bore, abondance isotopique en plutonium 238, 240, 241, 242 et américium 241) au lieu de trois pour le combustible UOx (burnup, enrichissement, proportion de poison soluble), ce qui s'avère être extrêmement coûteux.

Les résultats sur des scénarios de référence élémentaires et complexes sont comparés afin d'identifier et quantifier les sources d'erreur de la modélisation par les réseaux de neurones comparativement à des calculs de cœurs. Finalement, des pistes d'améliorations significatives pour la précision des inventaires, maintenant des temps de calcul raisonnables, sont proposées.

## ABSTRACT

Scenario codes are designed to provide a long-term vision about the production of radio toxic inventories, requirements of resources, and estimation of available resources for reprocessing. These codes require the modeling of each nuclear fuel cycle element as well as their interactions. They include the models of both the fuel fabrication plants and the reactors. The modeling of nuclear reactors entails solving the neutron transport equation which is very costly and is typically not done at the scale of a reactor. Implementing full-core transport computations in scenarios is impractical since nuclear scenarios involve hundreds of irradiation cycles. Additionally, in-core heterogeneous effects such as bundle burnup discrepancies or neutron leakage become significant at this scale.

This project assesses the impact of full-core calculations in nuclear scenario simulations with CLASS. In this dynamic scenario code, neural networks based on infinite assembly calculations are generally used to avoid full-core calculations while dealing with a priori unknown fuel composition. This project creates new reactor models calling explicit 3D diffusion full-core computations with DONJON5. These models require infinite assembly databases previously computed with DRAGON5. Some simplifications and optimizations are necessary before processing hundreds of infinite assembly databases as well as for quick and accurate full-core calculations.

The main challenge is to include unknown MOx fuels considering the needed interpolation of every nuclear property in an eight dimensional grid (burnup, enrichment, poison boron concentration, the mass proportion of plutonium 238, 240, 241, 242 and americium 241). On the other hand, UOx fuels require only a three-dimensional grid (burnup, enrichment, boron concentration) which is considerably less challenging in terms of computing time.

This project compares the scenario simulation results on both elementary and complex situation with different fuel management options to identify and quantify main sources of error in the neural network approach. Ultimately, the thesis makes several suggestions to improve inventories prediction in CLASS while keeping a relatively low computing time.

## TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE . . . . .	iii
REMERCIEMENTS . . . . .	iv
RÉSUMÉ . . . . .	vi
ABSTRACT . . . . .	vii
TABLE DES MATIÈRES . . . . .	viii
LISTE DES TABLEAUX . . . . .	xii
LISTE DES FIGURES . . . . .	xv
LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS . . . . .	xix
LISTE DES ANNEXES . . . . .	xx
CHAPITRE 1 INTRODUCTION . . . . .	1
CHAPITRE 2 LE CODE DE SCÉNARIO CLASS . . . . .	4
2.1 La simulation des réacteurs nucléaires dans CLASS . . . . .	5
2.1.1 Les réseaux de neurones . . . . .	6
2.1.2 La fabrication du combustible : le modèle de chargement . . . . .	7
2.1.3 L'évolution du combustible : le modèle d'irradiation . . . . .	8
2.2 Le couplage . . . . .	8
2.2.1 Le modèle de chargement avec DONJON5 . . . . .	9
2.2.2 Le modèle d'irradiation avec DONJON5 . . . . .	9
CHAPITRE 3 PRÉREQUIS DE NEUTRONIQUE . . . . .	11
3.1 La résolution de l'équation du transport des neutrons . . . . .	11
3.1.1 Le flux neutronique . . . . .	12
3.1.2 L'équation du transport des neutrons . . . . .	13
3.1.3 L'équation multigroupe . . . . .	14
3.1.4 L'autoprotection des résonances . . . . .	15
3.1.5 La forme intégrale de l'équation du transport . . . . .	16

3.1.6	Les conditions aux limites . . . . .	16
3.2	Les méthodes numériques de résolution . . . . .	17
3.2.1	Le <i>tracking</i> . . . . .	17
3.2.2	La méthode des probabilités de collisions . . . . .	17
3.2.3	La méthode des caractéristiques . . . . .	19
3.2.4	Les modèles de fuites . . . . .	20
3.3	La réduction du problème . . . . .	20
3.3.1	Le taux de réaction . . . . .	20
3.3.2	L'homogénéisation . . . . .	21
3.3.3	La condensation . . . . .	21
3.4	Les équations de Bateman . . . . .	22
3.5	L'équation de la diffusion . . . . .	23
CHAPITRE 4	CALCUL DE RÉSEAU . . . . .	25
4.1	Étude de l'homogénéisation . . . . .	27
4.1.1	Échelle cellule élémentaire . . . . .	27
4.1.2	Échelle assemblage . . . . .	31
4.1.3	Échelle assemblage avec différents enrichissements . . . . .	34
4.2	Étude du <i>tracking</i> . . . . .	35
4.3	Étude de l'autoprotection des résonances . . . . .	36
4.4	Étude des conditions aux limites . . . . .	39
4.5	Étude de la discrétisation temporelle . . . . .	39
4.6	Validation avec code Monte-Carlo et choix de la discrétisation en énergie. . .	40
4.7	Calcul du réflecteur . . . . .	46
4.8	Exemples de résultats de calculs de réseau . . . . .	48
CHAPITRE 5	CALCUL DE CŒUR . . . . .	51
5.1	Étude de la discrétisation géométrique . . . . .	52
5.2	Étude du <i>tracking</i> . . . . .	55
5.3	Étude des paramètres pour le calcul de flux . . . . .	56
5.4	Étude de la discrétisation temporelle . . . . .	57
5.5	Étude de la méthode d'interpolation . . . . .	57
5.6	Étude du plan de rechargement . . . . .	58
5.6.1	Nécessité de différencier les plans de chargement UOx et MOx . . . .	61
5.6.2	Prédiction des burnups au moment du rechargement . . . . .	68
5.7	Calcul automatique de l'enrichissement . . . . .	75
5.8	Calcul automatique de la concentration de bore critique . . . . .	76

5.8.1	Efficacité du bore . . . . .	81
5.9	Impact des isotopes xénon 135, samarium 149 et plutonium 241 sur la simulation	83
5.9.1	Effet Xénon . . . . .	83
5.9.2	Effet Samarium . . . . .	86
5.9.3	Effet des désintégrations du plutonium 241 durant le rechargement .	86
5.10	Exemples de résultats de calculs de cœur . . . . .	88
5.11	Impact de la recherche de la criticité . . . . .	93
5.11.1	Comparaison entre un calcul de cœur à bore fixé à la valeur moyenne (intégrée sur le cycle) et un calcul de cœur critique à chaque itération	93
5.11.2	Comparaison entre un calcul de cœur à bore fixé à 0 ppm et un calcul de cœur critique à chaque itération. . . . .	94
CHAPITRE 6	CAS ÉTUDIÉS . . . . .	96
6.1	Composition des combustibles après refroidissement et avant retraitement . .	97
6.2	Isotopes étudiés individuellement . . . . .	98
6.3	Échantillonnage de la MULTICOMPO . . . . .	102
6.3.1	Discrétisation en burnup . . . . .	102
6.3.2	Perturbation via l'enrichissement . . . . .	102
6.3.3	Perturbation via la concentration de bore . . . . .	103
6.3.4	Perturbation via le vecteur isotopique du plutonium . . . . .	104
6.3.5	Choix de l'échantillonnage final . . . . .	105
CHAPITRE 7	RÉSULTATS ET COMPARAISON ENTRE LES CALCUL CLASS- PMC ET LES CALCULS CLASS-DONJON5 . . . . .	108
7.1	Calcul de la constante $k_{\text{seuil}}$ . . . . .	108
7.2	Précision des PMC pour le calcul d'enrichissement . . . . .	113
7.3	Écart sur les enrichissements prédits par les PMC en raison de l'incertitude sur le $\tilde{k}_{\text{seuil}}$ . . . . .	115
7.4	Écart entre les inventaires prédits par les PMC et DONJON5 au déchargement avec chargements identiques. . . . .	117
7.5	Écart entre le calcul couplé CLASS-DONJON5 et le calcul CLASS-PMC sur des scénarios élémentaires . . . . .	119
7.6	Écart entre le calcul couplé CLASS-DONJON5, le calcul CLASS-PMC et des calculs hybrides sur des scénarios complexes . . . . .	126
7.6.1	Scénario A. . . . .	129
7.6.2	Scénario B. . . . .	137
7.6.3	Scénario C. . . . .	140

7.6.4 Scénario D. . . . .	147
CHAPITRE 8 CONCLUSION . . . . .	150
RÉFÉRENCES . . . . .	154
ANNEXES . . . . .	158



## LISTE DES TABLEAUX

Tableau 4.1	Données géométriques pour le calcul d'assemblage. . . . .	26
Tableau 4.2	Vecteurs isotopiques des assemblages MOx de référence. . . . .	27
Tableau 4.3	Températures, masse volumique et puissance spécifique utilisées pour les simulations. . . . .	27
Tableau 4.4	Erreurs générées sur les surfaces et les volumes dans le calcul d'assemblage en fonction de différents paramètres de <i>tracking</i> . . . . .	36
Tableau 4.5	Discrétisation temporelle pour le calcul des MULTICOMPOs. . . . .	40
Tableau 4.6	Informations sur les bibliothèques de données nucléaires utilisées . . .	41
Tableau 4.7	Écarts relatifs sur les $k_{\text{eff}}$ et les inventaires isotopiques entre calculs DRAGON5 et SERPENT1. . . . .	45
Tableau 4.8	Éléments géométriques constitutifs du réflecteur et de la cuve du cœur réel. . . . .	47
Tableau 4.9	Éléments géométriques retenus pour le calcul des sections efficaces du réflecteur. . . . .	47
Tableau 5.1	Données géométriques pour la simulation du cœur. . . . .	54
Tableau 5.2	Concentrations de bore critique en début de cycle et enrichissements en fonction de la discrétisation géométrique pour un calcul UOx. . . .	55
Tableau 5.3	Concentrations de bore critique en début de cycle et enrichissements en fonction des paramètres de <i>tracking</i> pour un cœur UOx. . . . .	56
Tableau 5.4	Écart relatif (%) sur les inventaires au moment du déchargement (après quatre cycles simulés) en fonction des paramètres de discrétisation temporelle pour un cœur UOx. . . . .	57
Tableau 5.5	Écart relatif (%) sur les inventaires au moment du rechargement en fonction des méthodes numériques d'interpolation et des pas d'enrichissement de la MULTICOMPO pour un cœur UOx. . . . .	58
Tableau 5.6	Facteur de forme radial pour des réacteurs chargés entièrement avec chacun des combustibles de référence. . . . .	65
Tableau 5.7	Enrichissements calculés pour un réacteur chargé entièrement avec chacun des combustibles de référence. . . . .	76
Tableau 5.8	Concentrations de bore critique calculées immédiatement après rechargement pour un réacteur chargé entièrement avec chacun des combustibles de référence. . . . .	79

Tableau 5.9	Écarts sur les inventaires déchargés (hors PF) entre un calcul de cœur à concentration de bore fixée à la valeur moyenne du cycle et un calcul cœur avec recherche de criticité à chaque pas dans un cas UOx et un cas MOX2. . . . .	94
Tableau 5.10	Écarts sur les inventaires déchargés (hors PF) entre un calcul de cœur à concentration de bore fixée à 0 ppm et un calcul de cœur avec recherche de criticité à chaque itération dans un cas UOx et un cas MOX2. . .	95
Tableau 6.1	Données de déchargement de combustibles UOx standards. . . . .	97
Tableau 6.2	Pourcentages massiques des isotopes du plutonium dans le combustible usé prêt à être recyclé. . . . .	97
Tableau 6.3	Pourcentages extremums d'enrichissement des différents combustibles.	102
Tableau 6.4	Écart relatif (%) au calcul effectué avec un pas d'enrichissement de 0.50 % sur les inventaires isotopiques au moment du rechargement pour un cœur MOX1. . . . .	103
Tableau 6.5	Discrétisation des enrichissements pour le calcul des MULTICOMPOs.	103
Tableau 6.6	Discrétisation des perturbations en bore pour le calcul des MULTICOMPOs. . . . .	104
Tableau 6.7	Discrétisation des pourcentages massiques au sein du vecteur plutonium pour le calcul de la MULTICOMPO MOx (échantillonnage minimal). . . . .	104
Tableau 6.8	Discrétisation des pourcentages massiques au sein du vecteur plutonium pour le calcul de la MULTICOMPO MOx (échantillonnage maximal). . . . .	105
Tableau 6.9	Écarts sur les enrichissement et les concentrations de bore entre des calculs avec échantillonnage minimal et des calculs avec échantillonnage maximal . . . . .	106
Tableau 6.10	Écarts relatifs sur les inventaires des isotopes du plutonium entre des calculs effectués avec la MULTICOMPO MOx avec échantillonnage minimal et celle avec échantillonnage maximal . . . . .	106
Tableau 7.1	Vecteurs isotopiques du plutonium des assemblages MOx de référence dans l'évaluation des PMC. . . . .	108
Tableau 7.2	$k_{\text{seuil}}$ et $\tilde{k}_{\text{seuil}}$ pour différents combustibles, hypothèses simplificatrices et des burnups de déchargement de $49.8 \text{ GWj.t}_{\text{ML}}^{-1}$ . . . . .	111
Tableau 7.3	$\tilde{k}_{\text{seuil}}$ pour différents combustibles pour des burnups de déchargement de $45.5 \text{ GWj.t}_{\text{ML}}^{-1}$ . . . . .	112

Tableau 7.4	$\tilde{k}_{\text{seuil}}$ pour différents combustibles pour des burnups de déchargement de $55.4 \text{ GWj.t}_{\text{ML}}^{-1}$ . . . . .	112
Tableau 7.5	Enrichissements calculés par DONJON5 et les PMC avec la valeur de $\tilde{k}_{\text{seuil}}$ déterminée dans les tableaux 7.2, 7.3 et 7.4 ainsi que l'écart relatif entre ces valeurs pour divers combustibles et burnups cibles. . . . .	113
Tableau 7.6	Enrichissements calculés par les réseaux de neurones avec les valeurs de $\tilde{k}_{\text{seuil}}$ de référence déterminées dans les tableaux 7.2, 7.3 et 7.4 et les valeurs arbitraires de 1.040 et 1.050 ainsi que l'écart relatif entre ces valeurs pour divers combustibles et burnups cibles. . . . .	116
Tableau 7.7	Enrichissements calculés par les réseaux de neurones avec les valeurs de $\tilde{k}_{\text{seuil}}$ de référence déterminées dans les tableaux 7.2, 7.3 et 7.4 et les valeurs arbitraires de 1.020 et 1.030 ainsi que l'écart relatif entre ces valeurs pour divers combustibles et burnups cibles. . . . .	116
Tableau 7.8	Écarts relatifs (%) sur les inventaires déchargés entre des calculs effectués avec les PMC et avec DONJON5 . . . . .	118
Tableau 7.9	Écart relatif sur les inventaires au déchargement et dans les stocks entre le calcul CLASS-PMC et le calcul couplé CLASS-DONJON5 sur un scénario élémentaire. . . . .	121
Tableau 7.10	Caractéristiques des scénarios complexes de référence. . . . .	127
Tableau 7.11	Caractéristiques des modèles de réacteurs utilisés dans les scénarios. . . . .	129
Tableau 7.12	Écart relatif (%) sur les inventaires après 70 années pour le scénario A. . . . .	131
Tableau 7.13	Écart relatif (%) sur les inventaires après 70 années pour le scénario B. . . . .	137
Tableau 7.14	Écart relatif (%) sur les inventaires après 70 années pour le scénario C. . . . .	141
Tableau 7.15	Écart relatif (%) sur les inventaires après 70 années pour le scénario D. . . . .	147

## LISTE DES FIGURES

Figure 3.1	Sections efficaces totales des uranium 235 et 238. . . . .	12
Figure 4.1	Coupe axiale de l'assemblage simulé. . . . .	25
Figure 4.2	Coupe axiale de la cellule élémentaire de combustible. . . . .	28
Figure 4.3	Coupe axiale de la cellule élémentaire représentative d'un trou d'eau. . . . .	29
Figure 4.4	Comparaison de calculs d'assemblage entre un et quatre mélanges pour le combustible par cellule. . . . .	30
Figure 4.5	Huitièmes d'assemblages avec et sans différenciation des cellules de combustible en fonction de la proximité des trous d'eau. . . . .	32
Figure 4.6	Comparaison de calculs d'assemblages entre un et trois types de cellules de combustible différenciées. . . . .	33
Figure 4.7	Huitième d'assemblage avec trois enrichissements des crayons de combustible et différenciation en fonction de la proximité des trous d'eau. . . . .	34
Figure 4.8	Comparaison entre deux calculs d'assemblage MOx avec trois enrichissements des crayons de combustible et avec enrichissement moyenné. . . . .	35
Figure 4.9	Comparaison entre des calculs d'assemblages avec autoprotection sur <i>tracking</i> SYBILT: simplifié et des calculs avec autoprotection calculée sur <i>tracking</i> SYBILT: non simplifié. . . . .	38
Figure 4.10	Sections efficaces totales des isotopes du plutonium. . . . .	42
Figure 4.11	Distribution de flux par unité de léthargie avec maillage XMAS172. . . . .	43
Figure 4.12	Distribution de flux par unité de léthargie avec maillage SHEM281. . . . .	44
Figure 4.13	Géométrie pour le calcul de la composition du réflecteur. . . . .	48
Figure 4.14	Résultats des calculs d'assemblage pour deux combustibles UOx. . . . .	49
Figure 4.15	Résultats des calculs d'assemblage pour les combustibles MOx. . . . .	50
Figure 5.1	Représentation du quart de cœur réel. . . . .	52
Figure 5.2	Représentation du quart de cœur simulé. . . . .	53
Figure 5.3	Géométrie complète du cœur simulé. . . . .	54
Figure 5.4	Plans de rechargement des réacteurs UOx et MOx. . . . .	59
Figure 5.5	Plans de permutation des assemblages. . . . .	60
Figure 5.6	Nappe de flux thermique dans le plan médian (horizontal) du cœur à différents instants pour un combustible UOx enrichi à 4.00 % . . . . .	62
Figure 5.7	Nappe de flux thermique dans le cœur après $t = 150$ jours équivalents pleine puissance pour un combustible UOx enrichi à 4.00 %. . . . .	63

Figure 5.8	Fraction de flux neutronique par unité de léthargie en fonction de l'énergie pour des assemblages UOx et MOX2. . . . .	64
Figure 5.9	Nappe de flux thermique dans le plan médian (horizontal) du cœur à différents instants pour un combustible MOX2 enrichi à 7.80 % avec plan de rechargement UOx. . . . .	66
Figure 5.10	Nappe de flux thermique dans le plan médian (horizontal) du cœur à différents instants pour un combustible MOX2 enrichi à 7.80 % avec plan de rechargement MOx. . . . .	67
Figure 5.11	Corrélation entre pourcentage d'enrichissement (% ML) et proportion d'éléments fissiles parmi le vecteur plutonium. . . . .	68
Figure 5.12	Burnups initiaux, après un cycle, après quatre cycles et écarts entre la fin du premier cycle et la fin du quatrième cycle pour un cœur UOx et cycle de 350 jours. . . . .	72
Figure 5.13	Burnups initiaux déterminés empiriquement et corrigés selon la qualité du combustible MOx pour des cycles de 350 jours. . . . .	73
Figure 5.14	Burnups finaux après quatre cycles de 350 jours pour les différents combustibles MOx. . . . .	74
Figure 5.15	Écarts entre les burnup obtenus après 350 et $4 \times 350$ jours pour les combustibles MOx. . . . .	75
Figure 5.16	$k_{\text{eff}}$ en fonction du temps pour un réacteur chargé entièrement avec du combustible UOx (cycle de 350 jours) en l'absence de bore dans le modérateur. . . . .	77
Figure 5.17	$k_{\text{eff}}$ en fonction du temps pour des réacteurs chargés entièrement avec les combustibles MOx de référence (cycles de 350 jours) en l'absence de bore dans le modérateur. . . . .	78
Figure 5.18	Concentration de bore en fonction du temps (jours équivalents pleine puissance) pour un réacteur UOx et quatre cycles de 350 jours. . . . .	80
Figure 5.19	Concentrations de bore critique pour des réacteurs chargés uniformément avec les combustibles MOx de référence pour quatre cycles de 350 jours. . . . .	81
Figure 5.20	Efficacité du bore en fonction de l'enrichissement du combustible et de la proportion d'éléments fissiles dans le vecteur plutonium en début et fin de cycle. . . . .	83
Figure 5.21	Évolution du contenu massique en actinides entre le chargement et le déchargement (cycles de 350 jours) dans les cas UOx et MOX2. . . . .	88

Figure 5.22	Évolution du contenu massique en actinides (excepté uranium 238) des assemblages de combustible en fonction du nombre de cycles effectués. . . . .	90
Figure 5.23	Évolution du contenu massique en plutonium des assemblages de combustible en fonction du nombre de cycles effectués . . . . .	91
Figure 5.24	Évolution du contenu massique en actinides mineurs des assemblages de combustible en fonction du nombre de cycles effectués . . . . .	92
Figure 6.1	Schéma d'évolution des principaux actinides en REP. . . . .	99
Figure 6.2	Sections efficaces de fission des isotopes du plutonium, de l'américium et du curium en fonction de l'énergie. . . . .	101
Figure 7.1	$k_{\text{eff}}$ issus de calculs DRAGON5 pour la détermination de $k_{\text{seuil}}$ . . . . .	110
Figure 7.2	Écarts entre les réactivités prédites par les PMC et DRAGON5 pour différents combustibles pour des burnups de déchargement de 49.8 GWj.t <sub>ML</sub> <sup>-1</sup> . . . . .	115
Figure 7.3	Schéma représentatif d'un scénario élémentaire dans CLASS impliquant un seul réacteur. . . . .	120
Figure 7.4	Écart sur les inventaires à différents instants du scénario élémentaire pour les isotopes de l'uranium et du neptunium. . . . .	123
Figure 7.5	Écart sur les inventaires à différents instants du scénario élémentaire pour les isotopes du plutonium. . . . .	124
Figure 7.6	Écart sur les inventaires à différents instants du scénario élémentaire pour les isotopes de l'américium et du curium. . . . .	125
Figure 7.7	Schéma représentatif d'un scénario complexe dans CLASS impliquant des réacteurs UOX et un réacteur MOX. . . . .	126
Figure 7.8	Évolution des inventaires massiques en <sup>239</sup> Pu et <sup>241</sup> Pu dans les différents réacteurs (scénario A). . . . .	132
Figure 7.9	Évolution des inventaires massiques en <sup>238</sup> Pu, <sup>240</sup> Pu et <sup>242</sup> Pu dans les différents réacteurs (scénario A). . . . .	133
Figure 7.10	Inventaires cumulés chargés et déchargés dans les réacteurs MOx et présents dans les stocks UOx et MOx en plutonium (scénario A). . .	134
Figure 7.11	Inventaires massiques en plutonium et actinides mineurs au niveau du cycle (scénario A). . . . .	135
Figure 7.12	Qualité du plutonium disponible dans le combustible UOx déchargé et refroidi (scénario A) . . . . .	136
Figure 7.13	Inventaires cumulés chargés et déchargés en uranium 235 dans les réacteurs UOx (scénario A) . . . . .	136

Figure 7.14	Inventaires cumulés chargés et déchargés dans les réacteurs MOx et présents dans les stocks UOx et MOx en plutonium (scénario B). . .	138
Figure 7.15	Inventaires massiques en plutonium et actinides mineurs au niveau du cycle (scénario B). . . . .	139
Figure 7.16	Évolution des inventaires massiques en $^{239}\text{Pu}$ et $^{241}\text{Pu}$ dans les différents réacteurs (scénario C). . . . .	142
Figure 7.17	Évolution des inventaires massiques en $^{238}\text{Pu}$ , $^{240}\text{Pu}$ et $^{242}\text{Pu}$ dans les différents réacteurs (scénario C). . . . .	143
Figure 7.18	Inventaires cumulés chargés et déchargés dans les réacteurs MOx et présents dans les stocks UOx et MOx en plutonium (scénario C). . .	144
Figure 7.19	Inventaires massiques en plutonium et actinides mineurs au niveau du cycle (scénario C). . . . .	145
Figure 7.20	Qualité du plutonium disponible dans le combustible UOx déchargé et refroidi (scénario C). . . . .	146
Figure 7.21	Inventaires cumulés chargés et déchargés en uranium 235 dans les réacteurs UOx (scénario C) . . . . .	146
Figure 7.22	Inventaire en uranium 235 dans le cycle (scénario C) . . . . .	147
Figure 7.23	Inventaires cumulés chargés et déchargés dans les réacteurs MOx et présents dans les stocks UOx et MOx en plutonium (scénario D). . .	148
Figure 7.24	Inventaires massiques en plutonium et actinides mineurs au niveau du cycle (scénario D). . . . .	149
Figure A.1	Résultats des calculs d'assemblage pour deux combustibles UOx avec prise en compte des tubes guides. . . . .	159
Figure A.2	Résultats des calculs d'assemblage pour les combustibles MOx avec prise en compte des tubes guides. . . . .	160
Figure A.3	Comparaison entre des calculs d'assemblage avec prise en compte des tubes guides et le modèle ne comportant que des trous d'eau. . . . .	161

## LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS

UOx	Uranium Oxide ou Oxyde d'uranium
MOx	Mixed Oxide ou Oxydes mixtes
REP	Réacteurs à Eau sous Pression
JEPP	Jours Équivalents Pleine Puissance
ML	Métaux Lourds
PF	Produits de Fission
AM	Actinides Mineurs
pcm	pour cent mille
ppm	partie par million
mk	$10^{-3}$ k
burnup	unité de combustion exprimée en $\text{GWj} \cdot \text{t}_{\text{ML}}^{-1}$
LIFO	<i>Last In First Out</i> - Dernier entrant premier sorti
FIFO	<i>First In First Out</i> - Premier entrant premier sorti



## LISTE DES ANNEXES

Annexe A	Impact de la prise en compte des tubes guides dans le calcul de réseau	158
----------	--	-----

## CHAPITRE 1 INTRODUCTION

De nos jours, les questions de politique énergétique sont devenues des enjeux majeurs. Les réserves mondiales en énergies fossiles se raréfient et, bien que les énergies renouvelables se développent, la question du réchauffement climatique s'avère loin d'être réglée. L'énergie nucléaire, fossile, mais décarbonnée, est remise en cause dans certains pays alors qu'elle tend à être massivement déployée dans d'autres. La question du traitement des déchets issus des unités de production électronucléaires actuelles et futures soulève des questions qui deviennent de plus en plus pressantes dans le monde occidental avec l'arrivée en fin de vie des premiers parcs de réacteurs nucléaires à eau légère. Face à ces constats, un besoin important de compréhension de l'impact des décisions de politique énergétique a émergé. En ce qui concerne la production d'électricité d'origine nucléaire, les options de cycles du combustible (ouverts ou fermés), la construction éventuelle de réacteurs de quatrième génération ou une fermeture prématurée du parc existant sont susceptibles de changer profondément la radio-toxicité et les inventaires de déchets ou de matières valorisables à moyen et long terme.

Dans ce cadre, différents codes dits de scénarios ont été développés. Ces codes offrent des capacités de modélisation des interactions entre les éléments constitutifs d'un parc nucléaire comme, les unités de fabrication du combustible, les réacteurs et les stockages. Parmi ces codes certains se caractérisent par une flexibilité maximale et un temps d'exécution minimal en supprimant jusqu'aux désintégrations naturelles comme DYMOND [1] alors que d'autres permettent des couplages avec les calculs de réseau comme NFCSim [2]. Certains de ces codes utilisent des compositions de combustibles neufs et usés fixes et liées à une technologie de réacteur alors que d'autres utilisent des modèles physiques qui adaptent la composition des combustibles à charger dans chaque réacteur en fonction de l'isotopie des matières présentes dans les stocks et simulent l'évolution de ce combustible à l'image de COSI [3], Cyclus [4] ou de CLASS [5], afin de relier l'énergie produite par le réacteur avec le burnup et la composition des combustibles chargés et déchargés. La difficulté principale dans le cadre d'une simulation dynamique est que la composition de la ressource fissile est à priori inconnue. En effet, dans les cas de recyclage, la ressource fissile disponible change avec la composition du combustible à retraiter en fonction du niveau d'irradiation, de l'enrichissement de départ, de la durée du refroidissement et plus globalement, des conditions d'opération du réacteur. Enfin, notons que la majorité des codes de scénario est propriétaire [1–3] même si certains sont libres d'accès [4, 5].

La résolution de l'équation du transport des neutrons à l'échelle d'un réacteur nucléaire est,

sans simplification supplémentaire, à priori irréalisable étant donné la puissance des ordinateurs actuels. Ceci est dû au fait que les processus de résolution déterministes ou probabilistes actuellement disponibles nécessitent soit une discrétisation spatiale fine (cas déterministe) soit l'accumulation d'un nombre d'histoires de neutrons extrêmement important (cas probabiliste ou stochastique). En dehors des codes de scénario, des calculs de cœurs existent pourtant. Dans le cas des résolutions déterministes, ils s'appuient en général sur une approche double niveau [6] constituée d'un calcul de réseau (en transport) et d'un calcul de cœur (en diffusion). Bien que ces schémas double niveau permettent des calculs de cœur très rapides, le nombre d'itérations correspondant au chargement et au déchargement de plusieurs dizaines de réacteurs pendant des décennies conduit rapidement à faire exploser le temps d'exécution global des codes de scénario. En effet, chaque calcul de cœur implique, outre une discrétisation en burnup qui ne doit pas être trop grossière, de multiples sous itérations permettant la recherche des pénalités neutroniques à introduire (via du bore soluble ou un autre dispositif) afin d'en assurer la criticité. C'est pourquoi aucun des codes précédemment mentionnés n'effectue de calcul de cœur en cours d'exécution. Notons l'exception des Réacteurs à Neutrons Rapides (RNR) dans COSI [3] ou CLASS [5] liée au fait qu'un cœur RNR de type *breakeven* a une réactivité relativement constante ce qui permet d'éliminer les sous-itérations correspondant à la recherche de criticité à chaque itération.

L'objet de ce travail est de quantifier l'impact de la principale hypothèse simplificatrice utilisée dans le code de scénario CLASS, la modélisation de l'évolution du combustible en réacteur à eau sous pression ou réacteur thermique, par des calculs de réseau infinis additionnés d'un traitement numérique par rapport à des calculs de cœurs en diffusion et à trois dimensions sur la géométrie complète. L'impact d'hypothèses de calcul dans CLASS comme l'attribution d'une valeur constante aux pénalités neutroniques quelle que soit la nature du combustible ou encore la fixation de la concentration de bore à une valeur unique et non nulle dans l'ensemble des calculs d'assemblage, est analysé. Afin de restreindre le champ de l'étude tout en conservant des éléments caractéristiques des cycles complexes, le choix est fait de simuler un scénario comportant des réacteurs UOx et MOx de même puissance et de même géométrie. Les réacteurs sont chargés uniformément avec un seul type de combustible et sont considérés à l'équilibre du rechargement. Il s'agit d'hypothèses effectuées dans le cadre d'un exercice académique. Les études sont menées de manière à être le plus proche possible de la réalité physique des réacteurs et des contraintes industrielles, mais dans un souci de simplification, certains critères de sûreté, peuvent, ponctuellement, ne pas être satisfaits.

La première partie de ce document, détaille le fonctionnement du code de scénario CLASS [5]. Dans la section 2.1.1 est explicité le fonctionnement des réseaux de neurones utilisés ainsi que les modèles représentatifs des réacteurs fondés sur ces réseaux. La deuxième partie de ce docu-

ment introduit l'équation du transport des neutrons et se consacre à étudier les processus de simplification mis en œuvre dans le cadre de la résolution déterministe de cette équation avec la chaîne de calcul DRAGON5-DONJON5 [7,8]. La manière dont l'approche multigroupe est utilisée afin d'effectuer la résolution de l'équation du transport est explicitée dans la section 3.1.3. Dans le calcul de cœur avec DONJON5, des simplifications supplémentaires sont mises en œuvre. Parmi ces simplifications les processus d'homogénéisation et de condensation des sections efficaces sont détaillés dans les sections 3.3.2 et 3.3.3 et l'approximation de la diffusion dans la section 3.5. Les parties 4 et 5 présentent les choix de paramétrisation et quelques résultats pour les calculs de réseau et de cœur respectivement. Le calcul de cœur en diffusion requiert une base de données de calculs de réseau incluant l'ensemble des combustibles, des niveaux d'irradiation et des niveaux d'empoisonnement envisageables. Cette base de données, dénommée MULTICOMPO, contient les sections efficaces macroscopiques (microscopiques pour les isotopes d'intérêts), ainsi que les  $k_{\text{eff}}$  correspondant à plusieurs milliers de calculs assemblages pour 26 niveaux d'irradiation différents (entre 0 et 79.2 GWj.t $_{ML}^{-1}$ ). La partie 6 de ce travail résume les choix relatifs à la délimitation et l'échantillonnage des différents paramètres de cette base de données.

Une fois la MULTICOMPO calculée et les paramètres fixés pour le calcul de cœur en diffusion et à trois dimensions dans DONJON5, le couplage avec CLASS est effectivement réalisé. Les résultats correspondants au calcul de scénario effectué avec le système couplé et ceux effectués avec des réseaux de neurones sur la même base de données sont présentés dans la partie 7 et comparés aux résultats de travaux précédents [9]. Il est particulièrement intéressant d'étudier l'importance relative des effets de la prise en compte de l'échelle assemblage [9] avec ceux de la prise en compte de l'échelle cœur complet. L'ordre de grandeur des déviations observées est comparé avec celles obtenues par [10] dans le cas des RNR dans COSI6 et ce, bien que les réacteurs et les codes de scénarios concernés soient distincts.

Pour conclure ce projet statue sur l'opportunité de conserver le calcul de cœur complet dans CLASS ou de l'utiliser afin d'optimiser les paramètres des modèles numériques utilisés pour simuler les réacteurs dans les scénarios.

## CHAPITRE 2 LE CODE DE SCÉNARIO CLASS

CLASS (Core Library for Advanced Scenario Simulation) est un code de simulation dynamique du cycle du combustible nucléaire. Le langage de programmation utilisé est le C++ et le code est développé par les laboratoires de Subatech (Nantes, France), de l'IPN (Orsay, France), du LPSC (Grenoble, France) avec un soutien du LNC (IRSN, France).

Le code CLASS simule des parcs électronucléaires complexes et autorise des modifications dans leur structure au cours du temps. À chaque pas, les inventaires isotopiques et les flux sont actualisés. Les unités définies dans CLASS sont : les usines de fabrication, les réacteurs, les piscines de refroidissement, les usines de séparation et les stocks. À chaque rechargement chacun des réacteurs simulés fait appel à l'usine de fabrication qui génère un combustible respectant certains critères de performance propres au réacteur en question tout en s'assurant de la disponibilité des matières fissiles requises. La décroissance naturelle pendant la durée de la fabrication est reproduite puis le combustible est chargé en réacteur où est simulée son évolution sous irradiation pendant le temps de cycle du réacteur avant d'être déchargé dans la piscine de refroidissement. Le combustible en piscine subit ensuite une nouvelle phase de décroissance naturelle avant d'être transféré dans les stocks où il continue de décroître.

La simulation d'un scénario dans CLASS débute par la construction du vecteur temps. Ce vecteur détermine avant même le début du calcul, l'ensemble des instants auxquels les différentes unités du scénario sont amenées à interagir. Ceci suppose notamment que l'ensemble des durées des étapes simulées soient préalablement fixées. Ainsi, les dates de démarrage et d'arrêt des réacteurs, la durée de fabrication du combustible, le temps de refroidissement, etc., doivent être fixés dans le fichier d'exécution au sein de chacune des classes définissant les unités simulées. En effet, l'instant correspondant au chargement et au déchargement d'un réacteur génère automatiquement un second instant correspondant au début de la fabrication du combustible, un troisième instant correspondant au transfert du combustible utilisé vers la piscine de refroidissement, un quatrième instant correspondant au transfert du combustible utilisé refroidi vers les stocks, etc. Les temps correspondant aux instants où l'on souhaite effectuer des enregistrements sont également ajoutés. Le vecteur constitué de l'ensemble de ces éléments est fixé pour l'ensemble du calcul. Il ne peut pas être modifié au cours de l'exécution. L'exécution de CLASS consiste à se déplacer d'instant en instant le long de ce vecteur temporel et d'effectuer les opérations prédéterminées devant être réalisées à chaque pas.

Les stocks sont gérés par lots correspondant à l'agrégat de l'ensemble des déchargements effectués à un instant donné quelle que soit leur origine. Ces agrégats sont stockés sous la forme

d'un vecteur isotopique qui contient une suite d'isotope, leur état isomérique et leur masse. Quand ces vecteurs isotopiques sont dans les stocks, ils sont disponibles pour la fabrication des nouveaux combustibles à charger. Cette méthode de stockage permet d'alterner aisément entre des options de recyclage de type premier entrant premier sorti (FIFO - First In First Out ou FIFO), dernier entrant premier sorti (LIFO - Last In First Out ou LIFO) ou mixte (notée MIX), piochant alternativement dans les stocks les plus récents et les plus anciens. Les stocks sont constitués d'un ensemble de vecteurs représentant chacun un isotope. Ces vecteurs contiennent le numéro atomique  $Z$ , le nombre de nucléons  $A$ , l'état isomérique et le nombre de noyaux de l'élément considéré. Seulement quatre processus affectent l'évolution de ces vecteurs isotopiques : la fabrication du combustible, l'irradiation du combustible, la séparation chimique et la décroissance radioactive.

L'étape de séparation est définie dans CLASS comme un tri des éléments présents dans un stock. Elle consiste à isoler certains isotopes d'un vecteur isotopique d'origine avec une efficacité propre à chacun. Les isotopes présents dans le stock au moment de la séparation et non séparés sont envoyés dans un stock dénommé déchets. L'étape de décroissance naturelle est effectuée via des bases de données pour lesquels la proportion de 4000 isotopes (incluant les états isomériques) est préenregistrée en fonction du temps. Les désintégrations naturelles étant indépendantes de l'histoire ou de l'environnement des noyaux cette procédure permet des calculs extrêmement précis (de l'ordre de la seconde sur les désintégrations) à moindre coût. Les étapes de fabrication et d'évolution du combustible en réacteur sont deux processus nettement plus compliqués et sont détaillés dans la suite.

## 2.1 La simulation des réacteurs nucléaires dans CLASS

L'enjeu majeur de la simulation des réacteurs nucléaires dans le code de scénario est de produire deux résultats fondamentaux. Le premier est la valeur maximale de burnup atteignable en fonction du niveau d'enrichissement et de l'isotopie de combustible. Le second est la matrice des taux de réaction. Cette dernière contient l'ensemble des taux de réactions pour chacune des réactions isotopiques considérées, là aussi, en fonction de l'enrichissement et de l'isotopie du combustible. On appelle respectivement modèle de chargement et modèle d'irradiation les modules de CLASS fournissant ces résultats.

Afin de simuler correctement un réacteur, il est nécessaire de définir convenablement le combustible. Pour cela, diverses stratégies sont possibles. La plus simple consiste à utiliser des recettes prédéterminées. Ce qui revient à construire un combustible indépendamment de l'isotopie de la ressource disponible. Ceci peut conduire à accumuler un isotope fissile si son utilisation dans la recette est proportionnellement inférieure à son rythme de production

dans le parc et éventuellement, mener à des ruptures d’approvisionnement alors même que certaines ressources restent disponibles. Dans CLASS on cherche à maximiser l’utilisation de la ressource et à conserver les effets liés à chaque chargement des réacteurs. Le combustible est produit en fonction de la ressource fissile disponible et non pas via des recettes fixes.

La difficulté principale est que la composition de la ressource fissile est inconnue. Dans le cas MOx, le vecteur isotopique du plutonium change avec la composition du combustible UOx à retraiter. Le combustible est construit au cours de l’exécution du code de scénario tout en s’extrayant des difficultés liées à la résolution de l’équation du transport des neutrons et des équations de Bateman pour le cœur complet via l’utilisation de plusieurs modèles numériques. Ces modèles, présentés dans les sections suivantes, permettent à CLASS de conserver des temps d’exécution très faibles de l’ordre de quelques minutes. Ils permettent également de conserver des éléments fondamentaux de la physique du cycle via la variabilité et la dynamique des chargements et de la physique des réacteurs avec une influence de la qualité isotopique sur divers paramètres.

### 2.1.1 Les réseaux de neurones

Initialement, la construction dans CLASS du combustible pour les réacteurs MOx s’effectuait avec des modèles polynomiaux comme dans les travaux de [11]. Dans les dernières versions de CLASS et dans le cadre de ce travail c’est l’approche utilisant les réseaux de neurones détaillée par [12] qui est adoptée.

Les réseaux de neurones utilisés sont des Perceptrons MultiCouche (PMC) [13], ils consistent en l’association de diverses couches interconnectées et constituées chacune d’un nombre spécifique de neurones. Le principe est que chaque neurone d’une couche transmet sa sortie à l’ensemble des neurones de la couche suivante avec une pondération propre à chaque liaison neuronale. Par la suite, chaque neurone ayant reçu un argument applique une fonction appelée fonction d’activation, non linéaire à cet argument. Le processus est répété de couche en couche. Le résultat de la dernière couche, constituée d’un neurone unique, constitue l’observable recherché tandis que les arguments des neurones de la première couche correspondent à un jeu de paramètres spécifique appartenant au domaine étudié. La construction du réseau de neurones consiste à déterminer les poids spécifiques de chacune des liaisons neuronales. Pour ce faire, le réseau est entraîné en lui fournissant un grand nombre de jeux de paramètres d’entrée ainsi que les sorties associées. Les sorties effectivement obtenues via le réseau et les sorties attendues sont insérées dans une fonction d’erreur. C’est la minimisation de cette fonction d’erreur sur l’ensemble de la base de données d’entraînement qui détermine les poids des liaisons neuronales. La minimisation est effectuée via une méthode de type descente de

gradient. Notons que le jeu de poids utilisé initialement est tiré aléatoirement.

Dans CLASS ces PMC sont utilisés sur des bases de données de calculs de réseau afin de prédire les évolutions de réactivité en fonction de l'isotopie du combustible neuf en utilisant l'outil défini par [14]. Des centaines d'autres PMC du même type sont construits afin de prédire les sections efficaces pour les réactions  $(n,f)$ ,  $(n,\gamma)$  et  $(n,2n)$  d'un grand nombre d'isotopes. Dans les travaux de [12] comme dans ce projet, l'échantillonnage des calculs de réseau est aléatoire. Dans le cas du combustible MOx, 5000 compositions couvrant l'ensemble de l'espace isotopique à six dimensions sont utilisées; cinq dimensions correspondant aux plutoniums 238, 240, 241, 242 et américium 241 et une dimension correspondant à l'enrichissement (le plutonium 239 est pris comme la différence à l'unité des proportions isotopiques des autres éléments du vecteur plutonium). Dans le cas de l'UOx, 800 compositions couvrant aléatoirement l'espace à une seule dimension (l'enrichissement) sont considérées. Les réseaux de neurones sont ensuite implantés dans les deux modèles permettant la simulation des réacteurs nucléaires dans CLASS, le modèle de chargement et le modèle d'irradiation présentés dans la suite de cette partie.

### 2.1.2 La fabrication du combustible : le modèle de chargement

Le modèle de chargement des réacteurs de CLASS vise à déterminer la composition du combustible à fabriquer afin d'alimenter les réacteurs en fonction de la matière fissile disponible et de propriétés prédéfinies. En l'occurrence il s'agit d'atteindre une cible de burnup tout en assurant la criticité du cœur le long du cycle. Or en REP, cette réactivité décroît avec l'irradiation [15]. Cela revient donc à déterminer un enrichissement pour un temps de cycle souhaité (la masse du cœur étant fixée). Dans le cas où le lot courant ne permet pas de répondre au critère de burnup ou de criticité sur la totalité du cycle, CLASS agrège plusieurs stocks et l'isotopie de la matière disponible s'en trouve modifiée. Le processus de fabrication du combustible est donc répété itérativement afin de satisfaire les différents critères.

Dans ce modèle, la méthodologie développée dans [16] est utilisée. La réactivité du cœur est approchée par une moyenne des coefficients de multiplication infinis des différents assemblages le constituant. Le cœur ainsi modélisé peut être caractérisé entièrement par une pénalité en réactivité constante de plusieurs milliers de pcms. Cette pénalité permet de prendre macroscopiquement en compte les fuites neutroniques liées aux éléments de contrôle de la réactivité et aux structures. Néanmoins, cette approche ne permet pas de retranscrire les hétérogénéités inter assemblages propres à l'échelle cœur et éventuellement amenées à se propager dans le scénario ni le caractère variable de ces pertes. Or, les fuites neutroniques et autres absorptions parasites sont des fonctions du burnup mais surtout de la nature et de la composition



du combustible [17, 18]. Dans les calculs de scénario utilisant les réseaux de neurones [12] comme dans ce projet, la criticité du cœur est définie relativement à la valeur  $k_{\text{seuil}} = 1.039$ . La bascule de l'état sur-critique à sous-critique correspond à l'instant où la moyenne des  $k_{\infty}$  des assemblages est égale à cette valeur et ce quel que soit le type de combustible, la géométrie du cœur ou le plan de chargement. Ceci revient à imposer une pénalité constante de 3900 pcm à l'ensemble des assemblages constitutifs du cœur.

Ce modèle de chargement est extrêmement souple. En effet, l'application d'un simple facteur multiplicatif à la puissance électrique délivrée et à l'inventaire total du cœur permet de passer de la simulation d'un REP alimenté en combustible UOx à un autre. Dans le cas d'un calcul de cœur réel, il faut définir deux géométries complètes et deux plans de chargement à priori totalement distincts. En ce qui concerne les réacteurs alimentés en combustible MOx (totalement ou partiellement), la simplification apportée est encore plus importante puisque les géométries et plans de chargement deviennent également des fonctions du pourcentage de combustible MOx dans le réacteur et de la qualité isotopique de celui-ci.

### 2.1.3 L'évolution du combustible : le modèle d'irradiation

Le modèle d'irradiation est un modèle numérique dont l'objet est de déterminer l'évolution du combustible en cœur. Il fournit les compositions au cours du cycle et au moment du déchargement. Il s'appuie également sur les résultats de calcul réseau sur lesquels sont construits des réseaux de neurones de type PMC pour des centaines de réactions isotopiques. Ce modèle permet de s'abstraire des difficultés posées par le calcul de cœur concernant la définition des géométries et plans de chargement. Les résultats ainsi produits sont utilisés afin d'actualiser les inventaires contenus en cœur. Rappelons que dans CLASS seules les réactions  $(n,f)$ ,  $(n,\gamma)$  et  $(n,2n)$  sont considérées.

## 2.2 Le couplage

Cette section ne détaille pas le calcul de cœur proprement dit, mais décrit les modifications apportées au fonctionnement du code CLASS dans le cadre du couplage entre CLASS [5] et le calcul de cœur en diffusion de DONJON5 [8]. Le fonctionnement global du code de scénario et notamment la définition des unités élémentaires et du vecteur temps demeurent identiques. La modification principale consiste à créer des nouveaux modèles de réacteurs REP UOx et MOx. Concrètement, cela revient à substituer les appels aux modèles numériques de chargement et d'irradiation précédemment décrits par des nouveaux modèles.

### 2.2.1 Le modèle de chargement avec DONJON5

Dans le modèle de chargement modifié, CLASS écrit dans un fichier d'exécution DONJON5 le vecteur isotopique de la matière fissile disponible. Il s'en suit un calcul de cœur qui détermine l'enrichissement permettant d'assurer la condition de criticité en fin de cycle. Dans ce processus, la durée de cycle est fixée par l'utilisateur et c'est le burnup de déchargement qui varie ce qui est l'inverse du raisonnement effectué dans le cadre des modèles numériques basés sur les réseaux de neurones. Ceci vient du fait que les contraintes liées au rechargement effectif du cœur conduisent à définir un temps de cycle fixe alors que dans le cas d'une extrapolation du calcul de réseau celui-ci peut être modifié sans impact majeur. La recherche d'enrichissement consiste en un calcul de cœur en évolution à bore nulle. L'enrichissement est recherché comme la valeur minimale assurant un cœur critique au moment du rechargement. Ensuite, le code CLASS lit le fichier résultat écrit par DONJON5, et effectue une vérification de la disponibilité de la matière fissile. Autrement dit, il s'assure de la présence d'une quantité suffisante de matière fissile permettant de fabriquer le combustible neuf ainsi déterminé. Si oui, l'appel à l'usine de fabrication est effectué et le combustible est effectivement construit puis soumis à décroissance naturelle avant chargement en réacteur, si non, les stocks correspondants au lot courant et au lot suivant sont agrégés et le processus est répété avec un nouvel appel à DONJON5 qui fournit une nouvelle valeur d'enrichissement, etc.

### 2.2.2 Le modèle d'irradiation avec DONJON5

Dans le modèle d'irradiation, CLASS écrit un second fichier d'exécution DONJON5. Concrètement, un fichier d'exécution de référence et les procédures associés sont copiés, puis CLASS modifie les lignes du fichier d'exécution correspondant à la composition isotopique du combustible et à la cible de burnup avant de lancer l'exécution de DONJON5. Une fois le calcul DONJON5 terminé, CLASS va lire les concentrations isotopiques des isotopes d'intérêt dans les fichiers résultats de DONJON5. Cette nouvelle exécution simule l'évolution du cœur, avec la composition du combustible précédemment définie, en s'assurant de la criticité à chaque itération via une recherche de la concentration de bore critique. Le calcul est effectué avec une hypothèse de cœur chargé uniformément ce qui signifie que les assemblages ne diffèrent que par leur niveau d'irradiation et ont tous la même composition isotopique de départ. Les cœurs sont également supposés à l'équilibre du rechargement. Le calcul correspond à la simulation de l'évolution d'un combustible neuf sur quatre cycles ce qui inclut trois permutations des positions assemblages. Les assemblages initialement neufs sont environnés par des assemblages dont le burnup est prédit pour les lots 2, 3 et 4 au premier cycle, pour les lots 3 et 4 au deuxième cycle et pour le lot 4 uniquement au troisième cycle. Ceci suppose

de prédire très finement les burnups des assemblages ayant déjà effectué un, deux ou trois cycles. Si tel est le cas, la distribution de burnup est rigoureusement cyclique et l'hypothèse d'équilibre du rechargement est vérifiée. Cette hypothèse permet d'accélérer les calculs au prix d'une augmentation raisonnable de la complexité du problème. En effet, la prédiction des burnups initiaux s'opère relativement aisément via des corrections linéaires appliquées à des calculs de référence. Le détail de cette procédure de détermination des burnups initiaux et la validation des résultats associés sont résumés dans la section 5.6.2. Notons que cette validation n'est valable que dans le cadre de cœurs chargés uniformément. Si nous avons considéré des cœurs mixtes, c'est-à-dire contenant des combustibles UOx et MOx ou bien des assemblages de vecteur isotopique initiaux différents, le processus de mise à l'équilibre aurait été absolument nécessaire. Le résultat du calcul est un fichier dans lequel CLASS va ensuite lire les compositions des assemblages déchargés afin d'actualiser les stocks correspondants à 17 isotopes définis comme primordiaux dans le cadre de ce projet ( $^{234}\text{U}$ ,  $^{235}\text{U}$ ,  $^{236}\text{U}$ ,  $^{238}\text{U}$ ,  $^{237}\text{Np}$ ,  $^{238}\text{Pu}$ ,  $^{239}\text{Pu}$ ,  $^{240}\text{Pu}$ ,  $^{241}\text{Pu}$ ,  $^{242}\text{Pu}$ ,  $^{241}\text{Am}$ ,  $^{242m}\text{Am}$ ,  $^{243}\text{Am}$ ,  $^{243}\text{Cm}$ ,  $^{244}\text{Cm}$ ,  $^{245}\text{Cm}$  et  $^{135}\text{Xe}$ ). Dans ces calculs, des réactions non prises en compte dans CLASS sont simulées comme les réactions  $(n, 3n)$ ,  $(n, \alpha)$  ou  $(n, p)$ .

## CHAPITRE 3 PRÉREQUIS DE NEUTRONIQUE

L'objet de cette partie est de fournir au lecteur les clés minimales de compréhension des enjeux physiques et mathématiques concernant la résolution des équations fondamentales du problème : l'équation du transport des neutrons et le traitement de sa solution qui correspond au flux neutronique et au facteur de multiplication ; les équations de Bateman pour l'évolution des noyaux dans les réacteurs. Les notions utilisées sont tirées de [19], les justifications mathématiques de plusieurs des transformations présentées sont disponibles dans cet ouvrage.

### 3.1 La résolution de l'équation du transport des neutrons

#### La section efficace

Le taux de réaction  $R$ , permet de quantifier le nombre d'interactions qu'un neutron aura avec une particule de l'environnement durant un intervalle de temps élémentaire. Cette probabilité s'exprime en fonction de la densité particulaire du milieu  $N$ , de la vitesse du neutron  $V_n$ , de la densité de neutrons  $n$  et d'une grandeur dénommée section efficace microscopique, selon :

$$R = \sigma N V_n n \quad (3.1)$$

$R$  correspond alors au nombre de réactions par unité de temps et de volume. La section efficace microscopique, notée  $\sigma$  est homogène à une surface et est généralement exprimée en barns ( $10^{-24}\text{cm}^2$ ). On appelle section efficace macroscopique la grandeur, notée  $\Sigma$ , correspondant au produit de la densité particulaire par la section efficace microscopique :  $\Sigma = \sigma N$  et flux neutronique, noté  $\phi$ , le produit  $\phi = n V_n$ . La figure 3.1 présente des exemples de sections efficaces microscopiques.

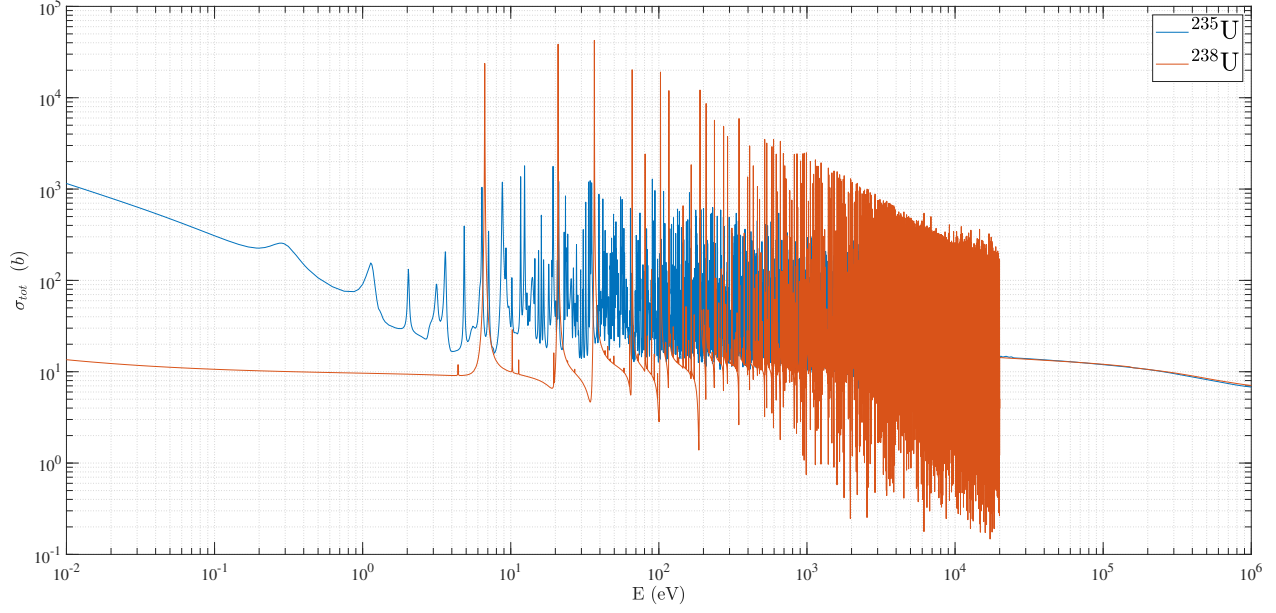


Figure 3.1 Section efficace totale de l' $^{235}\text{U}$  et de l' $^{238}\text{U}$  en fonction de l'énergie ( $1 \text{ meV} < E < 1 \text{ MeV}$ ).

### 3.1.1 Le flux neutronique

Les grandeurs intervenant dans l'expression du flux neutronique sont :

- Les trois paramètres de position à travers la variable  $\vec{r}$
- Les trois paramètres de vitesse du neutron en général décomposés selon l'énergie  $E = m \times \frac{V_n^2}{2}$  et la direction angulaire  $\vec{\Omega} = \frac{\vec{V}_n}{V_n}$ .
- Le paramètre temporel  $t$ .

La densité de neutrons est décrite par une variable  $n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)$  de telle manière que  $n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)d^3rdEd^2\Omega$  quantifie le nombre de neutrons ayant, à l'instant  $t$ , une énergie  $E$  à  $dE$  près, situés dans l'élément de volume  $d^3r$  centré en  $\vec{r}$  et ayant la direction  $\vec{\Omega}$  à  $d^2\Omega$  près. En physique des réacteurs on préfère traiter la grandeur dénommée flux angulaire,  $\phi$ , bien que n'ayant pas de signification physique, définie par :

$$\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) = \sqrt{\frac{2E}{m}} n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) = V_n n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) \quad (3.2)$$

Le flux neutronique angulaire est une distribution par rapport aux variables d'espace ( $\vec{r}$ ), de direction ( $\vec{\Omega}$ ), d'énergie ( $E$ ) et du temps. Dans de nombreuses situations, on préférera utiliser

la grandeur intégrale (le flux scalaire) obtenue via une réduction selon la variable  $\vec{\Omega}$  :

$$\phi(\vec{r}, E, t) = \int_{4\pi} d^2\Omega \phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) \quad (3.3)$$

### 3.1.2 L'équation du transport des neutrons

L'équation de transport se démontre en effectuant un bilan des neutrons dans le volume élémentaire de l'espace de phase  $d^3r dE d^2\Omega$  centré en  $(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$  pendant un intervalle de temps élémentaire  $\delta t$ , selon :

$$\begin{aligned} n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t + \delta t) - n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) = & \text{neutrons créés} \\ & - \text{neutrons perdus par collision} \\ & - \text{neutrons échappés du volume.} \end{aligned} \quad (3.4)$$

On introduit :

- Un terme source  $Q(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t + \delta t)$  tel que  $Q(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t + \delta t)\delta t$  corresponde au nombre de neutrons créés dans le volume élémentaire pendant  $\delta t$ .
- Un terme de collision tel que  $\Sigma(\vec{r}, E)\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)\delta t$  représente le nombre de neutrons perdus par collision dans le volume élémentaire pendant  $\delta t$ .  $\Sigma$  est la section efficace macroscopique totale (homogène à l'inverse d'une longueur).
- Un terme de fuites géométriques  $\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla}\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)\delta t$  qui quantifie le nombre de neutrons quittant le volume élémentaire pendant  $\delta t$ .

En reprenant l'équation 3.4, remplaçant les termes de création et disparition par les expressions ci-dessus, en changeant la variable densité au profit du flux angulaire et en divisant par  $\delta t$  que l'on fait tendre vers 0 on obtient :

$$\frac{\partial n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)}{\partial t} = Q(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) - \Sigma(\vec{r}, E)\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) - \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla}\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) \quad (3.5)$$

On s'intéresse à des situations stationnaires (ici, les régimes transitoires des réacteurs ne seront pas étudiés et leur impact sur les inventaires isotopiques est négligé) on traite alors uniquement l'équation faisant intervenir les six dimensions d'espace, de vitesse et d'énergie suivante :

$$Q(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \Sigma(\vec{r}, E)\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla}\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \quad (3.6)$$

Pour aller plus loin il est nécessaire de détailler la structure du terme source. Celui-ci se décompose d'une part en un terme de ralentissement quantifiant l'ensemble des neutrons qui,

au point  $\vec{r}$ , vont être ralentis pour arriver avec l'énergie  $E$  et la direction  $\vec{\Omega}$  dans le volume élémentaire  $d^3r dE d^2\Omega$  alors qu'ils étaient initialement à l'énergie  $E'$  avec la direction  $\vec{\Omega}'$  et d'autre part en un terme de création pure correspondant aux neutrons générés par les fissions. Si on suppose que le spectre de fission est isotrope, on peut écrire :

$$Q(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \int_{4\pi} d^2\Omega' \int_0^\infty dE' \Sigma_s(\vec{r}, E \leftarrow E', \vec{\Omega} \leftarrow \vec{\Omega}') \phi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') + \frac{1}{4\pi k_{eff}} \sum_{j=1}^J \chi_j(E) \int_0^\infty dE' \nu \Sigma_{f,j}(\vec{r}, E') \phi(\vec{r}, E') \quad (3.7)$$

où

- $\Sigma_s(\vec{r}, E \leftarrow E', \vec{\Omega} \leftarrow \vec{\Omega}')$  est la section efficace macroscopique de diffusion. Elle est la résultante des réactions amenant la création d'un neutron à la position, l'énergie et avec la direction souhaitée. Cette section efficace tient compte des différentes réactions  $(n, xn)$ .
- $k_{eff}$  est le coefficient de multiplication effectif. C'est le facteur divisant le terme source afin d'assurer l'équilibre stationnaire en équilibrant les absorptions et les fuites de neutrons avec l'apparition de neutrons via les fissions.
- $\chi_j(E)$  est le terme du spectre de fission et correspond à la densité de probabilité pour l'isotope  $j$  d'émettre un neutron à l'énergie  $E$  à  $dE$  près.
- $\nu \Sigma_{f,j}$  correspond au nombre de neutrons émis par la fission de l'isotope  $j$  multiplié par la section efficace macroscopique de fission de ce même isotope.

### 3.1.3 L'équation multigroupe

Pour résoudre l'équation 3.6, différentes techniques sont employées. Bien qu'il existe également des méthodes de résolution statistique de type Monte-Carlo, on utilise uniquement les méthodes de résolution déterministes dans ce travail. Ces dernières consistent à résoudre l'équation du transport par discrétisation numérique. L'équation 3.6 ne peut être résolue analytiquement en l'état, car elle est trop complexe. Afin de contourner cette difficulté, on adopte le formalisme multigroupe. Le raisonnement consiste à substituer aux grandeurs continues en fonction de l'énergie  $\phi$ ,  $\Sigma$  et  $\chi$  des fonctions constantes par morceaux  $\phi_g$ ,  $\Sigma_g$  et  $\chi_g$ . On utilise alors  $G$  groupes d'énergie différents, rangés dans l'ordre décroissant avec  $E_0$  l'énergie maximale. Le groupe d'énergie  $g$  correspond donc à la valeur prise entre les énergies  $E_g$  et  $E_{g-1}$ , on a donc  $\forall g \in [1...G]$  :

$$Q_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \Sigma_g(\vec{r}) \phi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) + \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) \quad (3.8)$$

et

$$Q_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \sum_{h=1}^G \int_{4\pi} d^2\Omega' \Sigma_{s,g \leftarrow h}(\vec{r}, \vec{\Omega} \leftarrow \vec{\Omega}') \phi_h(\vec{r}, \vec{\Omega}') + \frac{1}{4\pi k_{eff}} \sum_{j=1}^J \chi_{j,g} \sum_{h=1}^G \nu \Sigma_{f,j,h}(\vec{r}) \phi_h(\vec{r}) \quad (3.9)$$

où

$$\begin{aligned} \chi_{j,g} &= \int_{E_g}^{E_{g-1}} dE \chi_j(E) \\ \phi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) &= \int_{E_g}^{E_{g-1}} dE \phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \\ \phi_g(\vec{r}) &= \int_{E_g}^{E_{g-1}} dE \phi(\vec{r}, E) \\ \Sigma_g(\vec{r}) &= \frac{1}{\phi_g(\vec{r})} \int_{E_g}^{E_{g-1}} dE \Sigma(\vec{r}) \phi(\vec{r}) \\ \Sigma_{s,g \leftarrow h}(\vec{r}) &= \frac{1}{\phi_h(\vec{r})} \int_{E_g}^{E_{g-1}} dE \int_{E_{h-1}}^{E_h} dE' \Sigma_s(\vec{r}, E \leftarrow E') \phi(\vec{r}, E') \end{aligned}$$

### 3.1.4 L'autoprotection des résonances

On appelle phénomène d'autoprotection des résonances la contre-réaction du flux neutronique en cas de résonance de la section efficace. Ce phénomène a pour conséquence de limiter l'augmentation du taux de réaction, grandeur physique qui ne saurait varier dans des proportions équivalentes aux variations des sections efficaces (ou du flux neutronique). La diminution de flux est induite par l'augmentation du nombre de neutrons absorbés au voisinage de l'énergie résonnante ce qui engendre une diminution du terme  $n$  dans l'expression du flux neutronique.

Le problème est que le traitement multigroupe est fondé sur des grandeurs constantes par morceaux tant pour le flux neutronique que pour les sections efficaces. Le phénomène local de compensation précédemment évoqué est donc gommé dans la moyenne effectuée sur l'intervalle  $[E_g, E_{g-1}]$  ce qui peut engendrer des variations importantes et non physique du taux de réaction.

Le procédé d'autoprotection vise à déterminer des taux de réactions et des flux pour chacun des isotopes résonnants permettant d'obtenir des sections efficaces dites autoprotégées dans chacun des groupes de la discrétisation énergétique étudiée.

Dans le cadre du projet, une seule méthode d'autoprotection a été utilisée, il s'agit de la méthode des sous-groupes via l'appel au module `USS`: de DRAGON5.



### 3.1.5 La forme intégrale de l'équation du transport

On va chercher à obtenir la forme intégrale de l'équation en effectuant d'abord une transformation de cette dernière sous sa forme caractéristique. Cette procédure consiste à intégrer l'équation selon une direction (appelée caractéristique) correspondant à la trajectoire de la particule étudiée. Le changement de variable consiste à utiliser (cas stationnaire) :

$$\begin{cases} \frac{d}{ds} = \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \\ d\vec{r} = \vec{\Omega} ds \end{cases}$$

ce qui, substitué dans l'équation 3.8, permet d'écrire :

$$Q_g(\vec{r} + s\vec{\Omega}, \vec{\Omega}) = \Sigma_g(\vec{r} + s\vec{\Omega})\phi_g(\vec{r} + s\vec{\Omega}, \vec{\Omega}) + \frac{d}{ds}\phi_g(\vec{r} + s\vec{\Omega}, \vec{\Omega}) \quad (3.10)$$

on introduit ensuite le chemin optique noté  $\tau$  tel que  $\forall g \in [1...G]$  on ait :

$$\tau_g(s) = \int_0^s ds' \Sigma_g(\vec{r} + s'\vec{\Omega}) \quad (3.11)$$

ce qui permet de réécrire l'équation 3.10 pour obtenir la forme intégrale :

$$\phi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \int_0^\infty ds e^{-\tau_g(s)} Q_g(\vec{r} - s\vec{\Omega}, \vec{\Omega}) \quad (3.12)$$

### 3.1.6 Les conditions aux limites

Lors du calcul d'assemblage en milieu infini, il est nécessaire d'imposer des conditions aux limites du domaine étudié. En effet, si les flux sortants de la géométrie simulée sont déterminés par le calcul, les flux entrants dans cette géométrie (provenant des autres éléments du réseau) sont eux, à priori, inconnus.

Les deux options envisageables sont :

- la réflexion spéculaire pour laquelle la frontière est imposée comme plan de réflexion. L'angle de retour d'un neutron ayant quitté la géométrie est alors fixé par les relations :  $\phi_g(\vec{r}_s, \vec{\Omega}) = \phi_g(\vec{r}_s, \vec{\Omega}')$ ,  $\vec{\Omega} \cdot \vec{N}(\vec{r}_s) = -\vec{\Omega}' \cdot \vec{N}(\vec{r}_s)$  et  $\vec{\Omega} \times \vec{\Omega}' \cdot \vec{N}(\vec{r}_s) = 0$  où  $\vec{N}(\vec{r}_s)$  représente la normale sortante au point  $\vec{r}_s$  de sortie du domaine géométrique. C'est une condition de réflexion exacte si le réseau est infini.
- la réflexion isotrope pour laquelle les neutrons quittant le domaine spatial reviennent avec une distribution angulaire isotrope. Cette approximation permet des temps de calcul beaucoup plus faibles. Elle trouve sa justification dans le fait qu'elle représente

particulièrement bien les neutrons thermiques, primordiaux pour la fission, ayant des libres parcours moyens très faibles et de ce fait dépendant très peu de leur direction d'émission initiale.

### 3.2 Les méthodes numériques de résolution

#### 3.2.1 Le *tracking*

Afin de résoudre l'équation du transport des neutrons sous sa forme intégrale (équation 3.12) il est nécessaire d'utiliser une méthode numérique d'intégration : une technique de quadrature. Cette procédure repose sur la création de lignes d'intégration à travers le domaine spatial étudié et l'attribution à chacune de ces lignes d'un poids spécifique. Il suffit ensuite, d'évaluer la fonction selon chacune de ces lignes et de sommer les contributions ainsi obtenues en les pondérant avec les valeurs définies par la quadrature. On appelle *tracking* la procédure consistant à tracer les différentes lignes d'intégration.

Dans une géométrie à deux dimensions le *tracking* est piloté par deux paramètres. Le premier paramètre est le nombre d'angles azimutaux  $N_\varphi$ . Le deuxième paramètre est la densité de lignes selon chacune des directions étudiées. Notons que, comme cela a été mentionné dans la partie précédente, les conditions aux limites peuvent également influencer le *tracking*. Par exemple, dans le cas d'une condition de réflexion spéculaire les lignes d'intégrations sont obligatoirement cycliques. La relation entre les différentes directions étudiées  $\vec{\Omega}_i$  et leur pondération  $\omega_i$  est donnée par :

$$\int_{2\pi} d\Omega = 2 \sum_{i=1}^{N_\varphi} \omega_i \vec{\Omega}(\varphi_i) = 2\pi \quad (3.13)$$

Dans le cadre de ce projet, on utilise uniquement des *trackings* produits par le module NXT : [20] de DRAGON5.

#### 3.2.2 La méthode des probabilités de collisions

La méthode des probabilités de collision est une méthode numérique de résolution reposant sur la discrétisation spatiale de la forme intégrale de l'équation de transport (équation 3.12). On opère dans un premier temps une réduction de variable afin d'éliminer les dépendances angulaires et un changement de variable  $\vec{r}' = \vec{r} - s\vec{\Omega}$  et  $s = |\vec{r} - \vec{r}'|$  amenant :

$$\phi_g(\vec{r}) = \int_{4\pi} d^2\Omega \phi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \int_{4\pi} d^2\Omega \int_0^\infty ds e^{-\tau_g(s)} Q_g(\vec{r} - s\vec{\Omega}, \vec{\Omega}) = \int_\infty d^3r' \frac{e^{-\tau_g(s)}}{s^2} Q_g(\vec{r}') \quad (3.14)$$

Ensuite, on découpe la géométrie en sous-régions de volume  $V_i$ . Il est important d'avoir une discrétisation fine de la géométrie, car on suppose que les sources de neutrons  $Q_{i,g}$  sont constantes dans chacune des régions  $V_i$ . En multipliant par  $\Sigma_g(\vec{r})$  et en intégrant sur une région  $V_j$ , avec  $Q_g(\vec{r}) = Q_{i,g}$  constant par région, on obtient :

$$\int_{V_j} d^3r \Sigma_g(\vec{r}) \phi_g(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi} \int_{V_j} d^3r \Sigma_g(\vec{r}) \sum_i Q_{i,g} \int_{V_i} d^3r' \frac{e^{-\tau_g(s)}}{s^2} \quad (3.15)$$

où, après substitution de la section efficace de diffusion par le premier terme de son développement en polynôme de Legendre,  $\Sigma_{s,i,g \leftarrow h, \vec{\Omega} \leftarrow \vec{\Omega}'} = \frac{\Sigma_{s0,i,g \leftarrow h}}{4\pi}$  les sources valent :

$$Q_{i,g} = \sum_h \Sigma_{s0,i,g \leftarrow h} \phi_{i,h} + \frac{1}{k_{\text{eff}}} \sum_{j=1}^J \chi_{j,g} \sum_h \nu \Sigma_{f,j,h} \phi_{i,h} \quad (3.16)$$

ce qui permet de simplifier l'équation 3.15 en :

$$V_j \Sigma_{j,g} \phi_{j,g} = \sum_i Q_{i,g} V_i P_{ij,g} \quad (3.17)$$

avec

$$\begin{aligned} \phi_{j,g} &= \frac{1}{V_j} \int_{V_j} d^3r \phi_g(\vec{r}) \\ \Sigma_{j,g} &= \frac{1}{V_j} \int_{V_j} d^3r \Sigma_g(\vec{r}) \phi_g(\vec{r}) \\ P_{ij,g} &= \frac{1}{4\pi V_i} \int_{V_i} d^3r' \int_{V_j} d^3r \Sigma_g(\vec{r}) \frac{e^{-\tau_g(s)}}{s^2} \end{aligned}$$

$P_{ij,g}$  est donc la probabilité pour un neutron du groupe d'énergie  $g$ , né dans la région  $V_i$  et émis de manière isotrope, d'effectuer sa première collision dans une région  $V_j$ . En considérant que les sections efficaces macroscopiques totales sont constantes sur les domaines  $V_i$  l'équation 3.17 peut être simplifiée via l'utilisation des probabilités de collision réduites :

$$p_{ij,g} = \frac{P_{ij,g}}{\Sigma_{j,g}} = \frac{1}{4\pi V_i} \int_{V_i} d^3r' \int_{V_j} d^3r \frac{e^{-\tau_g(s)}}{s^2} \quad (3.18)$$

ce qui, substitué dans l'équation 3.17, permet une écriture particulièrement simple de l'équation donnant le flux, selon :

$$\phi_{i,g} = \sum_j Q_{i,g} p_{ij,g} \quad (3.19)$$

Remarques :

- La méthode des  $P_{ij}$ , de par l'hypothèse d'uniformité du terme source, requiert un échantillonnage spatial fin.

- La méthode des Pij requiert le calcul de la matrice des probabilités de collision. Cette matrice de dimension  $N \times N$  (pour chaque groupe d'énergie) est particulièrement lourde à stocker et requiert un temps de calcul important.
- La combinaison des remarques précédentes limite les cas d'utilisation à des géométries restreintes sans quoi le temps de calcul deviendrait déraisonnable.

Une fois les probabilités de collision obtenues (par un procédé d'intégration numérique suivant le *tracking* précédemment défini pour chacun des groupes d'énergie et dans chacune des régions) le flux est ensuite calculé itérativement via différents processus itératifs :

- Itérations externes : dans ce processus on fixe les sources de fission à une constante, on effectue des itérations dites internes, puis on recalcule la source de fission avec le flux multigroupe ainsi obtenu. On réinjecte et on procède de même jusqu'à convergence sur le  $k_{\text{eff}}$  et le flux.
- Itérations internes : dans ce processus on connaît les sources de fission (fixées par les itérations externes) et on cherche à déterminer les sources de diffusion. On commence avec le groupe d'énergie la plus grande et on peut ainsi calculer les sources de diffusion du groupe suivant. En effet, il n'y a pas de remontée en énergie lors de la diffusion pour les neutrons étant initialement à de hautes énergies. Dans le cas du domaine thermique, les remontées en énergie sont possibles on procède alors à des itérations dites thermiques.

La combinaison des modules **ASM:** et **FLU:** de DRAGON5 permet d'utiliser la méthode des probabilités de collision. Dans ce projet, c'est essentiellement cette méthode et donc ce module qui est utilisé. Seul le calcul de réflecteur fera appel à la méthode des caractéristiques détaillée ci-après.

### 3.2.3 La méthode des caractéristiques

La méthode des caractéristiques ou MoC consiste également à calculer itérativement le flux multigroupe sur des trajectoires traversant la géométrie du problème. Le *tracking* est identique à celui utilisé dans la méthode des probabilités de collisions. Dans cette méthode on manipule la grandeur flux angulaire. Les flux angulaires entrant et sortant de la géométrie sont reliés par l'expression suivante :

$$\phi_j^{\text{sortant}}(k) = \phi_j^{\text{entrant}}(k) + \left[ \frac{Q_j}{\Sigma_j} - \phi_j^{\text{entrant}}(k) \right] (1 - e^{-\Sigma_j L_k}) \quad (3.20)$$

où  $L_k$  est la longueur du segment d'intégration  $k$ . Le flux moyen est déterminé comme la somme des contributions selon chacune des directions étudiées et pondérées par la quadrature.

Un autre type d'itération apparaît dans cette méthode en sus des itérations internes et externes, les itérations de convergence spatiale des courants.

La méthode permet de résoudre le même problème que la méthode des probabilités de collisions en utilisant uniquement un vecteur de dimension  $N + L$  (avec,  $N$  le nombre de régions et  $L$  le nombre de surfaces externes excluant les interfaces entre deux régions) là où la méthode des Pij requiert le traitement d'une matrice  $N \times N$ . Néanmoins, le traitement par la méthode des caractéristiques nécessite une lecture du fichier de *tracking* à chaque itération interne (opération effectuée une unique fois dans le cas des Pij) ce qui peut s'avérer extrêmement coûteux.

Le module MCCGT: de DRAGON5 permet d'utiliser un *tracking* créé via le module NXT: avec la méthode des caractéristiques elle-même disponible dans les modules ASM: et FLU:. Ici, cette méthode est utilisée uniquement dans le calcul de réflecteur.

### 3.2.4 Les modèles de fuites

Lors du calcul de réseau (ou d'assemblage) on ne connaît pas à priori l'état neutronique de l'élément du réseau étudié (valeur du  $k_{\text{eff}}$ ). Étant donné que le réacteur est dans une situation stationnaire, le plus simple et le plus réaliste est d'imposer une condition de stationnarité à chacun des éléments du réseau. Pour ce faire, on utilise les modèles de type  $B_n$  [21]. Dans le cadre de ce projet, seule l'approche B1 homogène est considérée.

On prendra alors  $k_{\text{eff}} = 1$  et des fuites seront artificiellement créées pour forcer cette condition. On définit  $k_{\infty}$  comme la valeur du  $k_{\text{eff}}$  en l'absence de fuites.

Les calculs de flux neutronique et les fuites associés sont effectués par le module FLU: de DRAGON5.

## 3.3 La réduction du problème

Afin d'obtenir des calculs de réseau et de cœur sur des échelles de temps raisonnables plusieurs processus de réduction du problème sont mis en œuvre en sus de l'approche multigroupe. Ces méthodes s'appuient sur des principes d'équivalence autour de la notion fondamentale de taux de réaction.

### 3.3.1 Le taux de réaction

Dans une région  $i$ , de volume  $V_i$ , le taux de réaction pour le groupe d'énergie  $g$  ( $g \in [1...G]$ ) s'exprime en fonction du flux neutronique sur le volume et pour le groupe d'énergie considéré

$\phi_{i,g}$  et de la section efficace macroscopique  $\Sigma_{i,g}$  associée à ce volume et ce groupe d'énergie de la manière suivante :

$$T_{i,g} = \Sigma_{i,g} \phi_{i,g} V_i \quad (3.21)$$

Le taux de réaction correspond à une grandeur physique (contrairement au flux neutronique) c'est pourquoi les principes d'équivalences détaillées dans les parties suivantes s'attachent à le conserver. Notons qu'il s'agit d'une grandeur additive comme les sections efficaces.

### 3.3.2 L'homogénéisation

Le processus d'homogénéisation consiste à déterminer une valeur de la section efficace macroscopique totale correspondant à la réunion de  $N$  régions de volume  $V_i$  réduisant la dimension de l'objet traité de  $N$  à 1. Comme cela a déjà été dit, le procédé consiste à conserver le taux de réaction de cette réunion de sous-régions. Comme le taux de réaction est une grandeur additive, cela revient à chercher une section efficace homogénéisée notée  $\Sigma_H$  satisfaisant :

$$\Sigma_H \sum_{i=1}^N \phi_i V_i = \sum_{i=1}^N \Sigma_i \phi_i V_i \quad (3.22)$$

Dans le cadre de ce projet, différentes homogénéisations sont effectuées :

- Pour le calcul de réseau : les mélanges de même nature (couronnes de combustible, gaine, caloporteur, etc.) de l'ensemble des cellules sont homogénéisés.
- Pour le calcul de cœur : l'ensemble des cellules correspondant à un assemblage sont homogénéisées en une seule cellule représentative de l'assemblage complet.
- Pour le calcul de cœur : l'ensemble des cellules correspondant au réflecteur (diverses couches d'acier et d'eau) sont homogénéisées en une seule cellule représentative du réflecteur.

L'homogénéisation est effectuée avec le module **EDI** : de DRAGON5.

### 3.3.3 La condensation

Le processus de condensation est le pendant du processus d'homogénéisation pour les groupes d'énergie. Il consiste à déterminer une valeur de section efficace macroscopique correspondant à la réunion de  $G$  groupes d'énergie pour réduire les dimensions de l'objet traité de  $G$  à 1. Le traitement consiste toujours à conserver le taux de réaction, on cherche cette fois une section

efficace équivalente  $\Sigma_C$  satisfaisant :

$$\Sigma_C \sum_{g=1}^G \phi_g V = \sum_{g=1}^G \Sigma_g \phi_g V \quad (3.23)$$

qui peut se simplifier en :

$$\Sigma_C = \frac{\sum_{g=1}^G \Sigma_g \phi_g}{\sum_{g=1}^G \phi_g} \quad (3.24)$$

Dans le cadre de ce projet, un seul processus de condensation est mis en œuvre. Il consiste à regrouper l'ensemble des groupes d'énergie (172, 281 ou plus) en deux valeurs. Le premier, dit thermique, correspondant à la réunion des groupes d'énergie inférieure à 0.625 eV et le second, dit rapide, à la réunion des groupes d'énergie supérieure à ce seuil. En réalité, les processus d'homogénéisation et de condensation sont effectués simultanément dans le traitement. Il faudra garder à l'esprit cette double simplification notamment dans l'analyse des variations des sections qui peuvent être un effet purement géométrique, purement spectral ou combiné.

La condensation est, comme l'homogénéisation, effectuée via l'appel au module **EDI** : de **DRAGON5**.

### 3.4 Les équations de Bateman

Il s'agit des équations couplées donnant l'évolution des densités isotopiques  $N_i$  en tenant compte des réactions de fission, d'absorption, de capture et des désintégrations naturelles des noyaux radioactifs. Dans le cas général d'un isotope  $i$  environné par  $I$  isotopes différents les équations de Bateman s'écrivent :

$$\frac{dN_i}{dt} = -\lambda_i N_i - \sigma_{a,i} \phi + \sum_{j=1}^I (\sigma_{j \rightarrow i} \phi + Y_{i,j} \sigma_{f,j} \phi + \lambda_{j \rightarrow i} N_j) \quad (3.25)$$

où

$\lambda_i$  : constante de désintégration de l'isotope  $i$ .

$\sigma_{a,i}$  : section efficace microscopique d'absorption de l'isotope  $i$  (incluant la fission).

$\sigma_{j \rightarrow i}$  : section efficace microscopique de formation de l'isotope  $i$  à partir de l'isotope  $j$  (hors fission).

$Y_{i,j}$  : rendement de fission pour la production de l'isotope par fission de l'isotope  $j$ .

$\sigma_{f,j}$  : section efficace microscopique de fission de l'isotope  $j$ .

$\lambda_{j \rightarrow i}$  : constante de désintégration d'un isotope  $j$  menant à la formation de l'isotope  $i$ .

Ceci correspond au produit de la constante de désintégration de l'isotope  $j$  ( $\lambda_j$ ) et du rendement de production de l'isotope  $i$  pour cette désintégration.

Ces équations sont résolues avec le module **EV0** : de DRAGON5. Pour cela, il faut préalablement normaliser le flux scalaire. En effet, si  $\phi$  est solution de l'équation 3.6 alors  $\gamma\phi$  ( $\gamma$  réel) est également solution. Ceci est dû au fait que tous les opérateurs s'appliquant à  $\phi$  ont une réponse linéaire à la multiplication par un scalaire. En notant  $I$  le nombre d'isotopes fissionnant,  $\sigma_{f,g,i}$  les sections efficaces microscopiques de fission de l'isotope  $i$ ,  $\kappa_i$  l'énergie relâchée par fission de cet isotope et  $P_{\text{réseau}}$  la puissance correspondant à l'élément du réseau étudié, on peut alors écrire :

$$\sum_{g=1}^G \int_V d^3r \phi_g(\vec{r}) \sum_{i=1}^I \sigma_{f,g,i}(\vec{r}) \kappa_i(\vec{r}) = P_{\text{réseau}} \quad (3.26)$$

### 3.5 L'équation de la diffusion

Dans le cadre de cette maîtrise, une première étape a consisté à effectuer de nombreux calculs de réseau afin de couvrir l'éventail des évolutions d'assemblages de combustible UOx et MOx utilisés dans les réacteurs étudiés. Si ces calculs pouvaient être relativement longs (plusieurs heures pour le calcul d'assemblage en évolution complète) ils permettent de constituer une base de données et ne sont donc à effectuer qu'une seule et unique fois. La seconde étape du projet consiste à effectuer dans l'exécution du code de scénario nucléaire CLASS, de nombreux calculs de cœurs avec DONJON5. Bien que l'on puisse envisager de traiter l'équation du transport des neutrons pour le cœur complet directement avec les méthodes numériques discutées ci-avant, cela aurait engendré un coût de calcul faramineux et complètement irréaliste du point de vue scénario. C'est pourquoi, et cette fois pour le niveau de calcul cœur uniquement, on introduit le dernier niveau de simplification à savoir l'hypothèse de diffusion.



Tout d'abord on procède à la réduction de l'équation du transport multigroupe (équation 3.8) par rapport à la variable  $\vec{\Omega}$  et on introduit le courant neutronique  $\vec{J}_g(\vec{r})$  tel que :

$$Q_g(\vec{r}) = \Sigma_g(\vec{r})\phi_g(\vec{r}) + \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_g(\vec{r}) \quad (3.27)$$

où

$$\vec{J}_g(\vec{r}) = \int_{4\pi} d^2\Omega \vec{\Omega} \phi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) \quad (3.28)$$

Ensuite on utilise l'approximation de la diffusion qui consiste à poser empiriquement  $\vec{J}_g(\vec{r}) = -D_g(\vec{r})\vec{\nabla}\phi_g(\vec{r})$ , ce qui correspond à la loi de Fick, où  $D_g(\vec{r})$  est une matrice contenant les coefficients de diffusion directionnels, pour finalement obtenir l'équation de la diffusion :

$$\Sigma_g(\vec{r})\phi_g(\vec{r}) - \vec{\nabla} \cdot D_g(\vec{r})\vec{\nabla}\phi_g(\vec{r}) = Q_g(\vec{r}) \quad (3.29)$$

Dans cette équation, si on se remémore la forme du terme source  $Q_g(\vec{r}, \vec{\Omega})$  défini à l'équation 3.9, que l'on intègre selon les directions angulaires  $\vec{\Omega}$  et que l'on emploie le développement à l'ordre 0 de la section efficace de diffusion on obtient :

$$\Sigma_g(\vec{r})\phi_g(\vec{r}) - \vec{\nabla} \cdot D_g(\vec{r})\vec{\nabla}\phi_g(\vec{r}) = \sum_{h=1}^G (\Sigma_{s0,g \leftarrow h}(\vec{r}) + \frac{\chi_g}{k_{\text{eff}}} \nu \Sigma_{f,g,h}(\vec{r})) \phi_h(\vec{r}) \quad (3.30)$$

On réexprime ensuite l'équation 3.30 sous la forme du problème aux valeurs propres 3.31.

$$\left\{ \frac{[\chi]}{k_{\text{eff}}} [\nu \Sigma_f]^T - [\Sigma] + [\vec{\nabla} \cdot [D] \vec{\nabla}] \right\} [\Phi] = 0 \quad (3.31)$$

où

$$\begin{aligned} [\Phi]_g &= \phi_g \\ [\vec{\nabla} \cdot [D] \vec{\nabla}]_g &= \vec{\nabla} \cdot D_g \vec{\nabla} \\ \left[ \frac{[\chi]}{k_{\text{eff}}} [\nu \Sigma_f]^T - [\Sigma] \right]_g &= \Sigma_g - \sum_{h=1}^G (\Sigma_{s0,g \leftarrow h} + \frac{\chi_g}{k_{\text{eff}}} \nu \Sigma_{f,g,h}) \frac{\phi_h}{\phi_g} \end{aligned}$$

Celui-ci admet une seule solution réelle et positive autre que  $[\Phi] = 0$ , il s'agit de celle pour laquelle  $k_{\text{eff}}$  est maximal (en valeur absolue) voir [19]. Remarquons que dans cette équation, tout comme pour le calcul de réseau, si  $[\Phi]$  est solution alors  $\gamma[\Phi]$  ( $\gamma$  réel) est également solution. On utilise alors un procédé analogue à celui développé dans l'équation 3.26, mais en utilisant la puissance totale du réacteur et en sommant les contributions sur la géométrie correspondant au cœur complet en lieu et place de la puissance et la géométrie correspondant à un élément du réseau.

## CHAPITRE 4 CALCUL DE RÉSEAU

Le calcul de réseau consiste à déterminer les sections efficaces (voir section 3.1) macroscopiques ou microscopiques (pour les isotopes traités isolément) correspondant au combustible, au caloporteur et au réflecteur. Ce calcul concerne l'unité élémentaire du réseau interne au cœur du réacteur nucléaire (représenté sur la figure 5.1) à savoir : l'assemblage de combustible (représenté sur la figure 4.1). Il est effectué à deux dimensions via l'approche multigroupe (voir section 3.1.3) avec le code DRAGON5 [7], dans l'optique d'être chaîné avec un calcul de cœur complet en diffusion (voir section 3.5) effectué avec DONJON5 [8]. Les assemblages ont une forme de pavé droit à base carrée ayant une hauteur de l'ordre de 4 mètres pour une largeur d'environ 20 centimètres (soit un rapport 20 entre hauteur et base). Ceci justifie de traiter le problème de réseau à deux dimensions (ce qui revient à considérer une hauteur infinie). Le terme cellule désigne le  $\frac{1}{289}$  d'assemblage contenant un crayon de combustible (combustible et gaine) ainsi que le caloporteur à la fois modérateur, constitué d'eau légère, l'environnant.

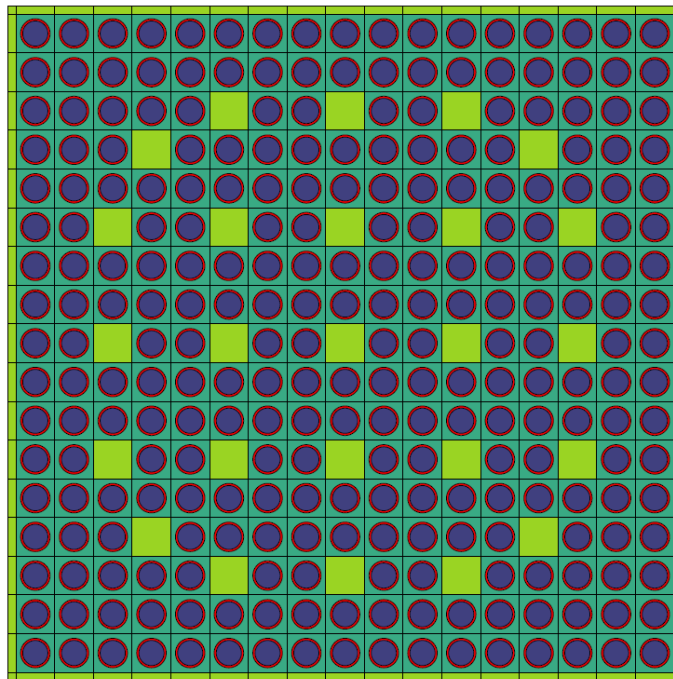


Figure 4.1 Coupe axiale de l'assemblage simulé. On distingue les crayons de combustible (en bleu), les gaines (en rouge) et l'eau entourant les crayons, dans les trous d'eau et dans la lame d'eau (en dégradé de vert).

La géométrie considérée est tirée d'un benchmark OCDE (EGAMCT). Dans cette géométrie, les tubes guides sont omis comme cela est fait dans de précédentes études internes à l'IPN d'Orsay dédiées à l'étude des performances des différents codes stochastiques. L'objectif initial était de comparer les résultats générés avec DRAGON5 avec des travaux fondés sur cette géométrie avec MURE [22]. Finalement, avec l'évolution du projet, le choix a été fait de générer à la fois les bases de données pour les réseaux de neurones et pour le calcul de cœur. Néanmoins, la géométrie est restée celle de l'étude initiale. Cette suppression pure et simple des tubes guides ne remet pas en cause la démarche méthodologique de ce travail ni les résultats puisqu'il s'agit de comparer deux modélisations de réacteurs dans un code de scénario à partir de résultats de calculs de réseaux identiques. De plus une étude de l'impact de la présence des tubes guides sur l'évolution de la réactivité et des inventaires présentée en Annexe A montre que les phénomènes physiques liés aux différences de nature, d'isotopie et d'enrichissement entre les combustibles sont conservés.

Les dimensions des principaux éléments géométriques constituant le modèle d'assemblage sont données dans le tableau 4.1.

Tableau 4.1 Données géométriques pour le calcul d'assemblage.

Paramètre (dénomination)	Dimension (cm)
Rayon externe du combustible ( $r_{\text{Com}}$ )	0.40958
Rayon externe de la gaine ( $r_{\text{Gai}}$ )	0.47980
Taille de la cellule ( $\delta$ )	1.25984
Largeur de la lame d'eau inter assemblages ( $\varepsilon$ )	0.25000
Nombre de crayons ( $N_{\text{Cra}}$ )	$17 \times 17 - 25$ (tubes guide et barres)
Pas du réseau ( $\Delta$ )	21.92 (incluant la lame d'eau)

La plupart des études présentées dans cette partie du document consistent à effectuer des comparaisons en fixant tous les paramètres excepté celui étudié. Cette méthodologie s'appuie sur l'étude de six combustibles de référence dénommés UOX1, UOX2, MOX1, MOX2, MOX3 et MOX4. Les combustibles UOX1 et UOX2 sont des combustibles UOx avec des enrichissements égaux respectivement à 3.50 % et 5.00 %. Les vecteurs isotopiques des combustibles MOX1, 2, 3 et 4 sont données dans le tableau 4.2. Dans la suite de cette partie, les notations sont simplifiées en notant uniquement MOX1, MOX2, MOX3 ou MOX4 alors que les combustibles étudiés correspondent aux valeurs d'enrichissements de 7.00 %, 7.86 %, 10.92 % et 9.41 %.

Tableau 4.2 Vecteurs isotopiques des quatre assemblages MOx de référence. Les pourcentages sont le rapport de la masse de l’isotope considéré sur la masse totale de plutonium (incluant l’américium 241).

Dénomination	$^{238}\text{Pu}$	$^{239}\text{Pu}$	$^{240}\text{Pu}$	$^{241}\text{Pu}$	$^{242}\text{Pu}$	$^{241}\text{Am}$
MOX1	1.98	62.25	22.50	8.00	5.00	0.27
MOX2	3.12	51.84	24.32	11.75	8.04	1.18
MOX3	2.87	46.99	33.91	4.54	10.92	0.77
MOX4	4.00	38.53	24.56	15.90	12.78	4.23

Le calcul d’assemblage est simplifié en utilisant certaines grandeurs caractéristiques de l’assemblage simulé plutôt que les distributions volumiques réelles de ces grandeurs. Cela est notamment le cas pour les températures et masses volumiques qui ont été prises constantes et égales aux valeurs indiquées dans le tableau 4.3.

Tableau 4.3 Températures, masse volumique et puissance spécifique utilisées pour les simulations.

Paramètre (dénomination)	Valeur (unité)
Température du combustible ( $T_{\text{Com}}$ )	900 (K)
Température de la gaine ( $T_{\text{Gai}}$ )	633 (K)
Température du caloporteur ( $T_{\text{Cal}}$ )	569.55 (K)
Masse volumique du combustible ( $\rho_{\text{Com}}$ )	10.4 ( $\text{g.cm}^{-3}$ )
Puissance volumique $P_v$	330.0 ( $\text{W.cc}^{-3}$ )

## 4.1 Étude de l’homogénéisation

### 4.1.1 Échelle cellule élémentaire

Le combustible est modélisé comme un cylindre plein ayant le rayon de la pastille de combustible. Les défauts liés aux surfaces de contact entre deux pastilles de combustible au sein du même crayon sont négligés. Les trous d’eau sont représentés par des pavés droits contenant uniquement du modérateur. En s’appuyant sur les travaux de [23], une discrétisation des pastilles de combustible en quatre couronnes est adoptée. Cela conduit à diviser le volume du combustible en autant de régions (de l’intérieur vers l’extérieur) correspondant respectivement à 50, 30, 15 et 5% du volume total. La discrétisation adoptée permet une correcte modélisation de l’influence du combustible en permettant notamment une autoprotection

spatiale différenciée pour chacune des sous-régions et surtout de considérer quatre niveaux d'irradiation distincts en son sein. Pour les calculs de flux, la géométrie est raffinée en distinguant plusieurs zones au sein du modérateur dans les trous d'eau et autour des crayons de combustible, dans le combustible sont conservées les quatre zones correspondant aux mélanges précédemment définis. Les figures 4.2 et 4.3 représentent les géométries correspondant à la simulation des cellules de combustible et des trous d'eau. La figure 4.4 présente les écarts engendrés par la non prise en compte de ces quatre couronnes dans le combustible. Les déviations sur les inventaires en plutonium 239 dans les combustibles MOx sont de l'ordre de 1 %. Pour l'uranium 235 dans les UOx l'écart est également notable, après 1500 jours d'évolution à pleine puissance il apparaît de l'ordre de 0.5 %. Pour les isotopes minoritaires comme les plutoniums 240, 241 et 242 les écarts sont également très importants de l'ordre de quelques pour cent. La modélisation de l'élément combustible à quatre couronnes est donc adoptée dans le cadre de ce projet d'autant que l'augmentation associée des coûts de calcul (de l'ordre de 30 %) reste raisonnable.

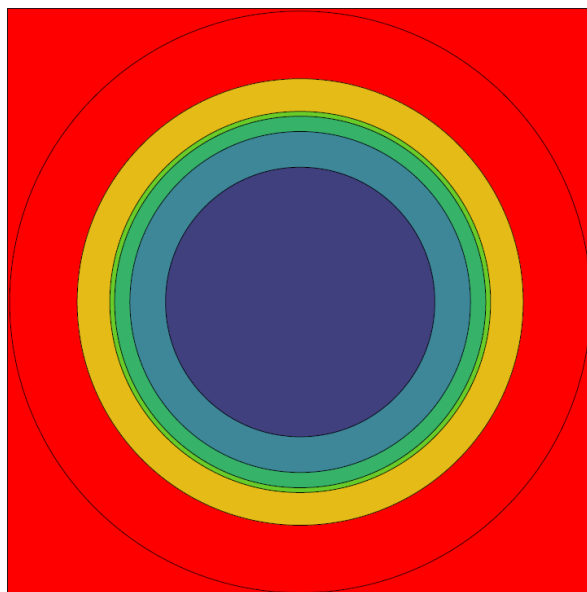


Figure 4.2 Coupe axiale de la cellule élémentaire contenant du combustible incluant quatre couronnes dans ce dernier (en dégradé du bleu au vert), la gaine (en jaune) et l'eau entourant le crayon combustible (en rouge). Le modérateur est discrétisé en deux zones pour le calcul du flux.

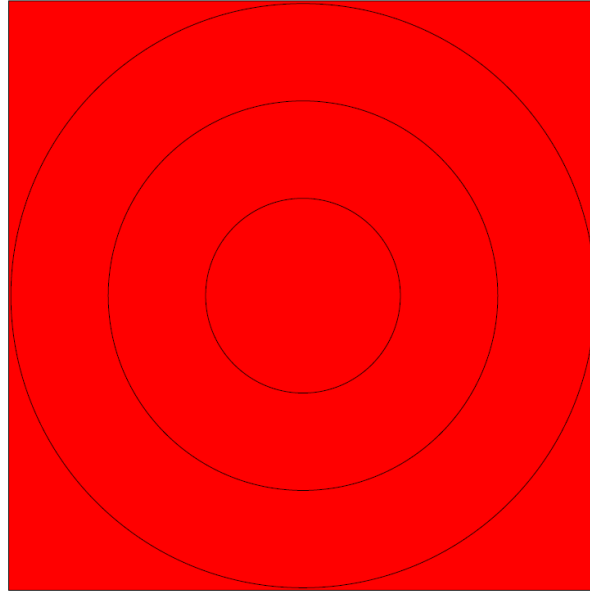


Figure 4.3 Coupe axiale de la cellule élémentaire représentative d'un trou d'eau avec trois couronnes considérées pour le calcul de flux.

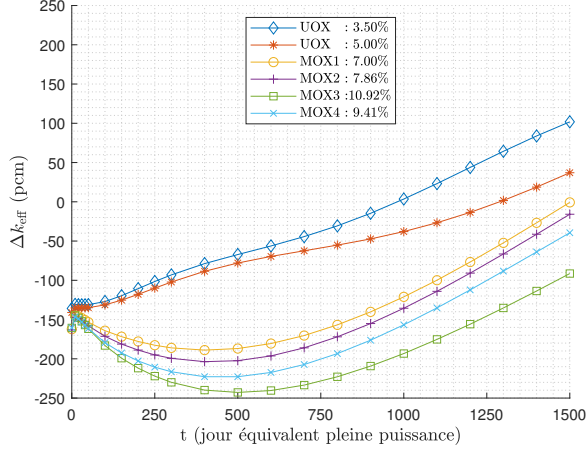
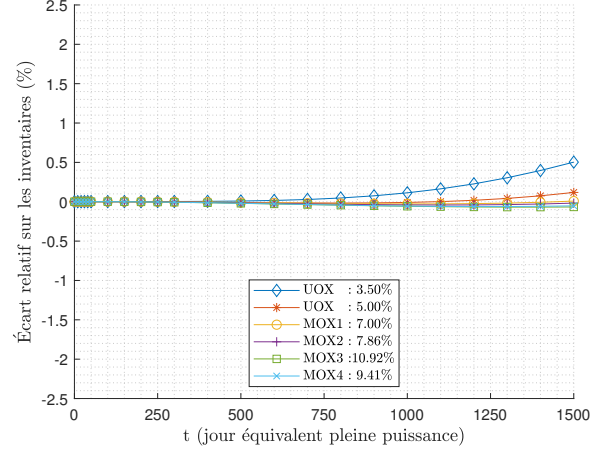
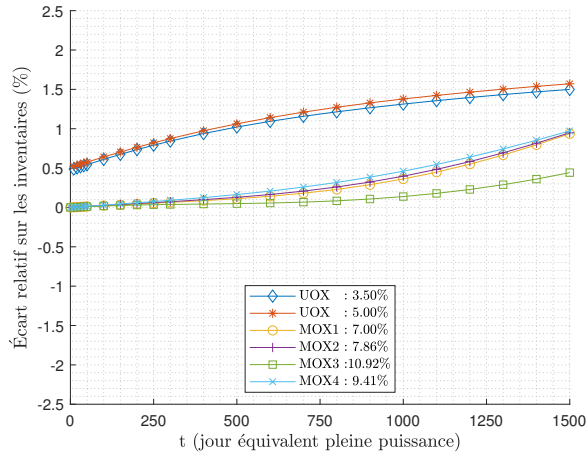
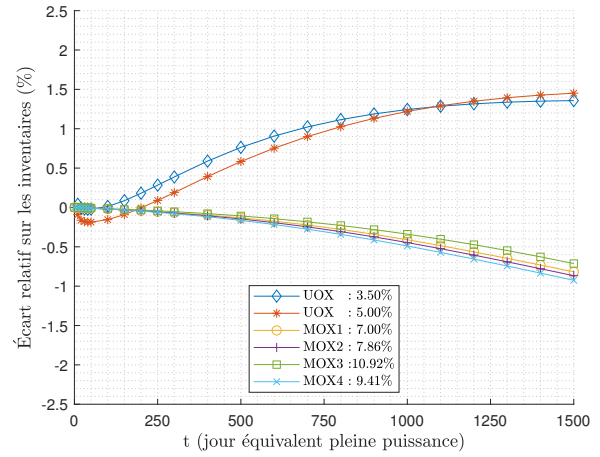
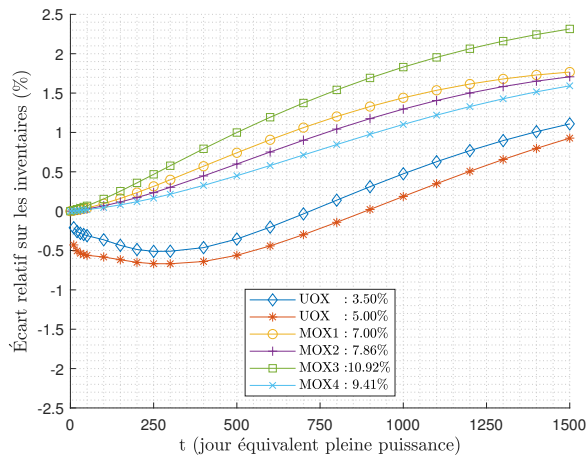
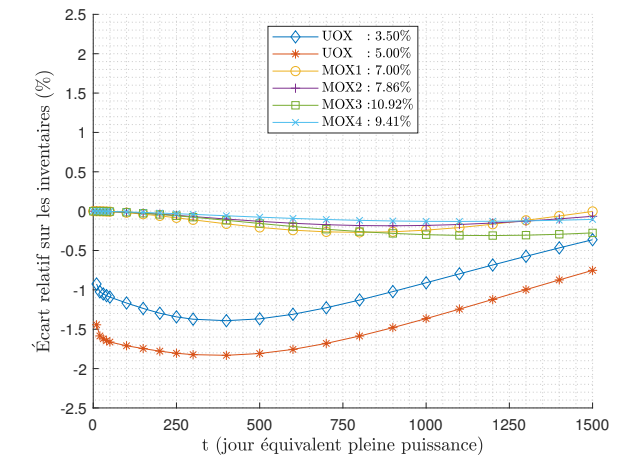
(a)  $k_{\text{eff}}$ .(b)  $^{235}\text{U}$ .(c)  $^{239}\text{Pu}$ .(d)  $^{240}\text{Pu}$ .(e)  $^{241}\text{Pu}$ .(f)  $^{242}\text{Pu}$ .

Figure 4.4 Comparaison de calculs d'assemblage entre un et quatre mélanges pour le combustible par cellule.

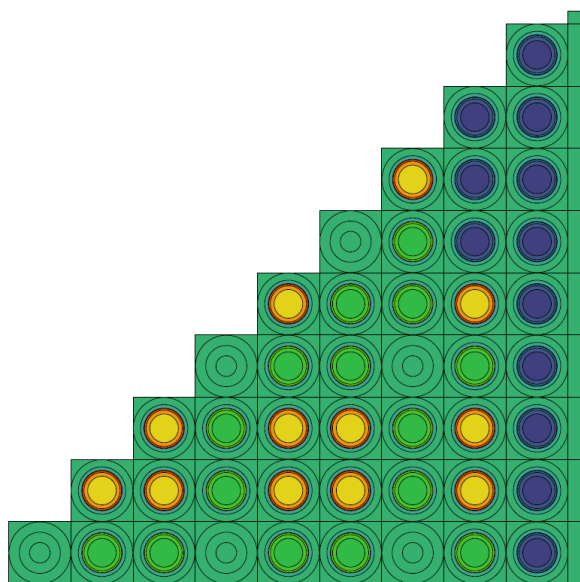
### 4.1.2 Échelle assemblage

Lors des calculs de transport, une réduction du nombre de mélanges est effectuée (en homogénéisant les sections efficaces et les flux comme cela est détaillé dans la section 3.3.2) afin, entre autres, de limiter la taille de la matrice des probabilités de collisions. Dans ce processus, les zones géométriques qui ont des spectres et des taux de combustion voisins sont regroupées.

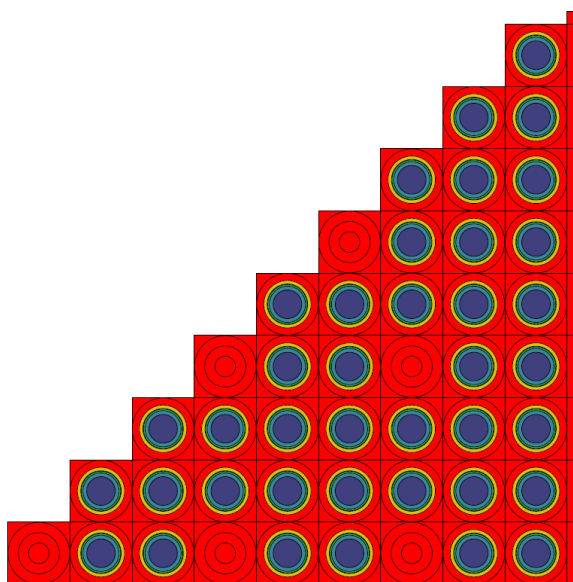
Une approche rigoureuse revient à considérer chaque cellule du huitième d'assemblage individuellement puisque chacun des crayons à un environnement unique. Néanmoins, une discrétisation totale serait bien trop coûteuse et, en général, les cellules ayant des voisinages similaires sont fusionnées. Puisque l'effet de spectre est principalement dû à la distance qui sépare le combustible du modérateur ou des éléments absorbants et étant donné la nature de l'assemblage étudié (assemblage infini, un seul enrichissement pour l'ensemble des crayons, absence de matériaux absorbants), la distinction étudiée est uniquement fonction de la proximité des trous d'eau. On distingue alors classiquement trois types de cellules, les cellules de type 1, 2 et 3 représentées sur la figure 4.5a respectivement en dégradés de vert, jaune et bleu. Une simplification encore plus poussée est envisageable en considérant l'ensemble des crayons comme un ensemble homogène ce qui conduit à la situation représentée sur la figure 4.5b. La situation non simplifiée correspond à celle où trois types de cellules sont considérées, la situation simplifiée revient, quant à elle, à ne considérer qu'un seul type de cellule. Dans tous les cas, le combustible de chacune des cellules est divisé en quatre couronnes concentriques comme détaillé en 4.1.1. Le nombre de mélanges différents correspondant au combustible est donc égal à 12 dans le premiers cas et 4 dans le second.

La figure 4.6 présente les différences relatives observées sur les  $k_{\text{eff}}$  et sur les inventaires entre les deux situations. Les déviations observées ; moins de 10 pcms sur les  $k_{\text{eff}}$ , moins 0.05 % sur les inventaires isotopiques des isotopes majoritaires et moins de 0.10 % pour les autres isotopes, montrent sans ambiguïté qu'il est acceptable par la suite de se limiter au calcul le plus simple. En notant que cette approximation permet un gain de l'ordre de 40 % sur les temps d'exécution, le calcul dans lequel les cellules ne sont pas différenciées est finalement retenu.





(a) Trois cellules de combustible différenciées.



(b) Cellules de combustible non différenciées.

Figure 4.5 Huitièmes d'assemblages avec et sans différenciation des cellules de combustible en fonction de la proximité des trous d'eau.

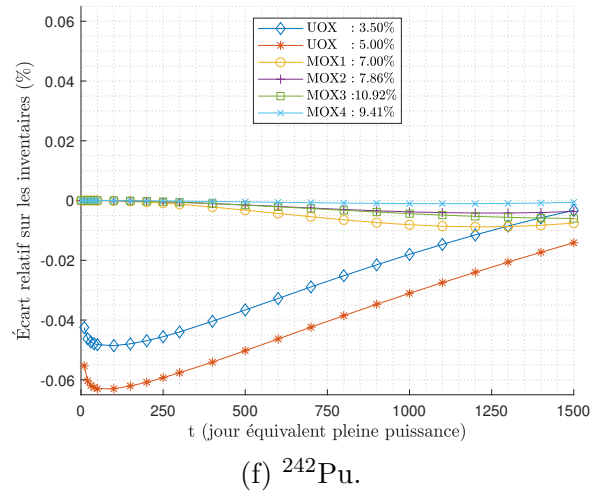
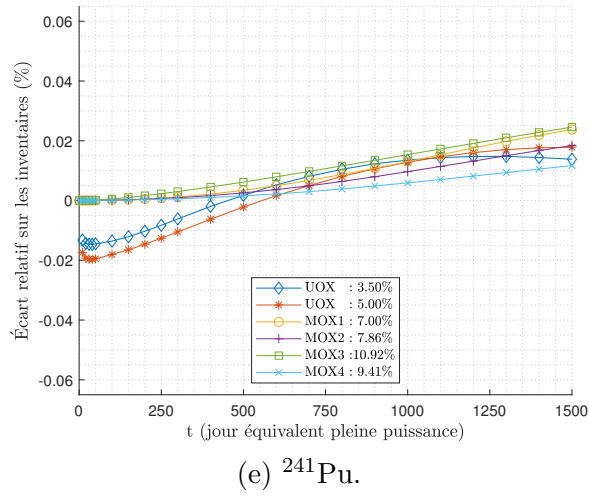
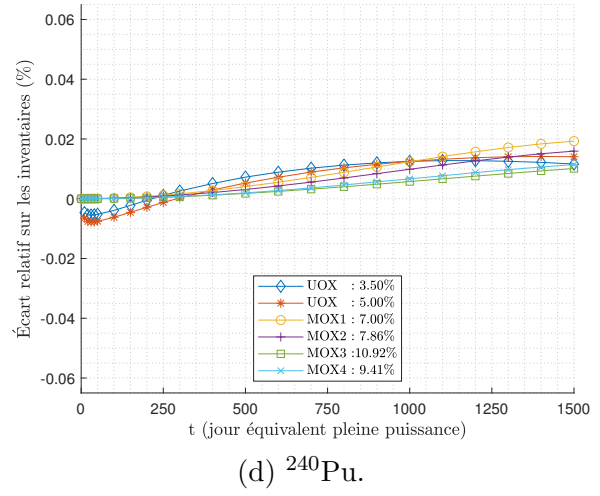
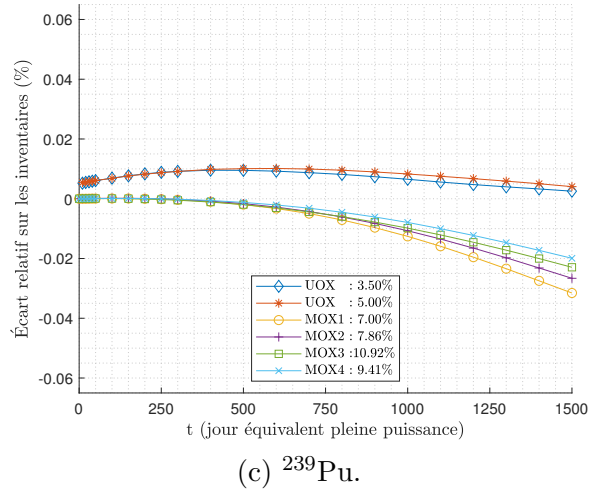
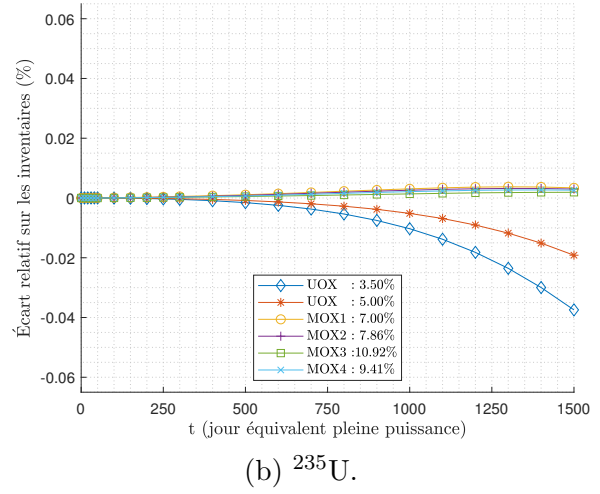
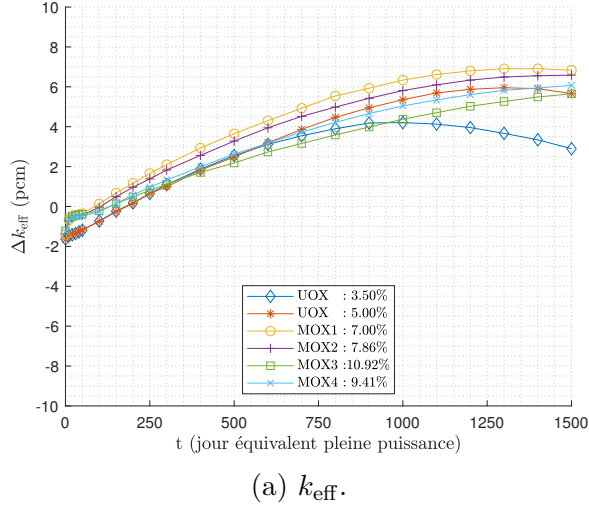


Figure 4.6 Comparaison de calculs d'assemblages entre un et trois types de cellules de combustible différenciées.

### 4.1.3 Échelle assemblage avec différents enrichissements

Comme cela a été vu dans la section précédente, il s'avère possible de réduire considérablement le problème dans le cas d'un assemblage homogène en ne distinguant pas les cellules selon leur environnement. Dans le cas des assemblages MOx, pour diverses raisons, différents niveaux d'enrichissements sont employés au sein d'un même assemblage. Ceci engendre des environnements de cellules très différents, et ce, non plus uniquement en fonction de la distance au modérateur. D'autre part, il faut garder à l'esprit que ce projet consiste à simuler des réacteurs alimentés en combustible MOx de qualité isotopique à priori inconnue. Or, les niveaux d'enrichissement et la répartition des différents types de crayons au sein d'un assemblage MOx sont étudiés en fonction de cette isotopie.

L'objet de cette étude est, sur un exemple, de quantifier l'erreur induite par la simplification qui consiste à modéliser un type de crayon unique représentatif de l'inventaire total en combustible (autrement dit ayant l'enrichissement moyen) en lieu et place de la situation réelle où des crayons ayant des enrichissements différents et traités isolément sont considérés. Pour effectuer cette comparaison, on essaie de limiter au maximum le nombre de biais autres que le niveau d'enrichissement. Les cellules sont regroupées en fonction de leur voisinage ce qui conduit à l'assemblage illustré à la figure 4.7 et présentant huit types de cellules différentes correspondant à 32 mélanges distincts (avec les quatre couronnes au sein de chaque crayon) pour les deux situations.

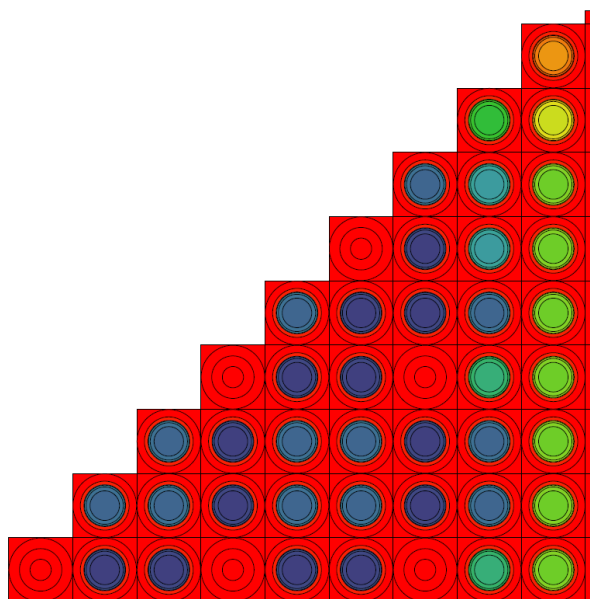


Figure 4.7 Huitième d'assemblage avec trois enrichissements des crayons de combustible et différenciation en fonction de la proximité des trous d'eau.

La figure 4.8a montre que l'impact sur la réactivité est de l'ordre de 100 à 200 pcm. La figure 4.8b montre, quant à elle, que les erreurs créées sur les inventaires isotopiques sont importantes, mais limitées à moins de 1% pour les isotopes d'intérêt. Cette simplification bien que grossière, est tout de même conservée dans la suite car il est impossible d'implémenter le niveau de précision correspondant aux assemblages zonés à moins de définir un modèle de zonage applicable à tous les enrichissements et toutes les isotopies de MOx. Cette étude permet néanmoins de montrer que la simplification consistant à effectuer nos calculs avec des crayons ayant l'enrichissement moyen n'est pas déraisonnable.

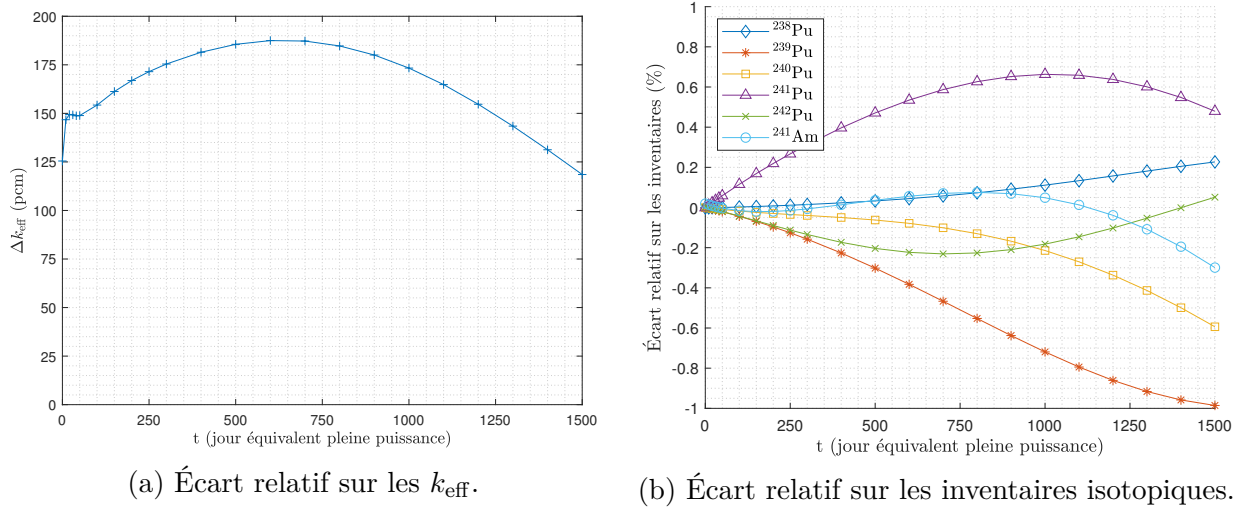


Figure 4.8 Comparaison entre deux calculs d'assemblage MOx avec trois enrichissements des crayons de combustible et avec enrichissement moyenné.

## 4.2 Étude du *tracking*

Comme mentionné dans la partie 3.2.1, le choix du *tracking* est fondamental dans les calculs de réseau. La quadrature utilisée permet d'assurer ou non une représentation correcte de la géométrie simulée et influe ainsi grandement sur la pertinence des résultats obtenus. Un *tracking* effectué via le module NXT: (*tracking* global) est utilisé dans le cadre de ce projet pour les calculs de flux.

Lors de l'utilisation du module NXT: la difficulté principale consiste à choisir adéquatement les paramètres de quadrature. Les résultats présentés dans le tableau 4.4 conduisent à opter pour un nombre d'angles égal à 9 et une densité de lignes égale à  $75.0 \text{ cm}^{-1}$ . Cela assure, entre autres, que l'erreur quadratique maximale pour chacune des régions reste inférieure à 0.55 % pour les surfaces comme pour les volumes.

Tableau 4.4 Erreurs générées sur les surfaces et les volumes dans le calcul d'assemblage en fonction de différents paramètres de *tracking*.

Paramètre		Erreur quadratique maximale (%)	
Nombre d'angles	Densité de lignes (cm <sup>-1</sup> )	Surface	Volume
13	75.0	0.94	0.91
13	65.0	1.28	1.42
13	55.0	0.81	2.12
13	45.0	1.20	4.32
11	75.0	0.33	1.03
11	65.0	0.34	1.39
11	55.0	0.58	3.02
11	45.0	0.58	2.91
<u>9</u>	<u>75.0</u>	<u>0.28</u>	<u>0.55</u>
9	65.0	0.47	1.05
9	55.0	1.20	5.09
9	45.0	0.80	3.80
7	75.0	0.44	1.14
7	65.0	0.94	1.54
7	55.0	3.11	2.94
7	45.0	1.20	4.73

### 4.3 Étude de l'autoprotection des résonances

Lors du calcul d'autoprotection spatiale des résonances, conserver le *tracking* global utilisé pour le calcul de flux pourrait être envisagé. Néanmoins, celui-ci doit être très précis afin que le flux le soit également, ce qui impose des coûts de calcul importants. Un *tracking* plus léger permettant d'accélérer considérablement les calculs peut en général être utilisé. En l'occurrence, le choix est fait d'utiliser un *tracking* faisant appel au module SYBILT:. Ce module permet d'établir un *tracking* par cellule puis utilise des recollements via des courants d'interfaces entre les différentes cellules constitutives de l'assemblage. Le module d'autoprotection universel USS: est ensuite employé avec une méthode des sous-groupes. Les résultats de l'autoprotection effectuée avec ce module entraînent des déviations minimales y compris dans le cas de maillages énergétiques légers à 172 groupes et pour des combustibles UOx comme MOx [24].

Une première comparaison a été effectuée entre d’une part, les résultats de calculs effectués avec les combustibles UOX1 et MOX1 utilisant un tracking **NXT** : pour l’autoprotection et d’autre part des calculs utilisant un tracking **SYBILT** :. Les écarts mesurés (courbes non présentées) sur les  $k_{\text{eff}}$  sont inférieurs à 80 pcm et ceux sur les inventaires isotopiques inférieurs à 0.1 % quel que soit l’isotope du plutonium ou de l’uranium étudié. Étant donné que le calcul effectué avec le *tracking* global engendre un coût de calcul environ 100 fois plus important dans le module d’autoprotection. Le tracking simplifié (**SYBILT** : ) est retenu, pour les calculs d’autoprotection, dans la suite de ce projet.

Au-delà de cette première simplification, il est également envisagé un second niveau d’approximation en fusionnant certaines cellules du réseau entre elles. Le processus est similaire à celui qui est détaillé dans la section 4.1.2. Les cellules ayant des voisinages semblables sont considérées comme un ensemble uniforme. Il faut également ajouter une rotation des différentes cellules, car les courants entrants et sortants des cellules sont également fusionnés. Il apparaît alors primordial d’additionner entre eux des courants de même nature (cellule combustible vers trou d’eau, cellule combustible vers cellule combustible, etc.). L’ensemble de ces processus est intégré automatiquement à l’appel au module **GEO** :. Notons également que lors de l’appel au module **SYBILT** : les options par défaut pour le nombre d’angles et la densité de lignes sont conservés. Ceci revient à prendre un nombre d’angles égal à 10 et une densité de lignes égale à  $480 \text{ cm}^{-1}$ . Le mot clé DP01 est utilisé afin de prendre en compte la partie linéairement anisotrope des courants sortants de chaque cellule (12 en l’occurrence).

Avec cette simplification consistant à fusionner les cellules identiques en une seule cellule, chaque appel au module d’autoprotection dure moins d’une seconde dans le cas d’un *tracking* alors qu’il prenait plusieurs milliers de secondes dans la situation non simplifiée. Des études menées sur les assemblages de références et présentées sur la figure 4.9 montrent une influence négligeable de cette approximation. L’écart relatif sur les  $k_{\text{eff}}$  se limite à moins de 10 pcm et est, pour les inventaires, inférieur à 0.08 % (relatifs) après 1500 jours d’évolution. Cette hypothèse simplificatrice permettant d’accélérer considérablement les calculs est donc adoptée.

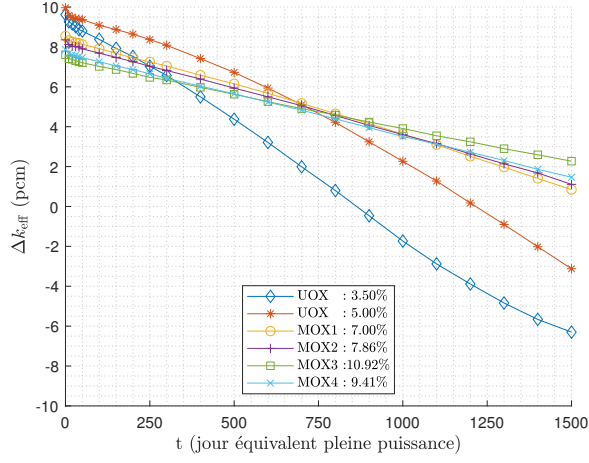
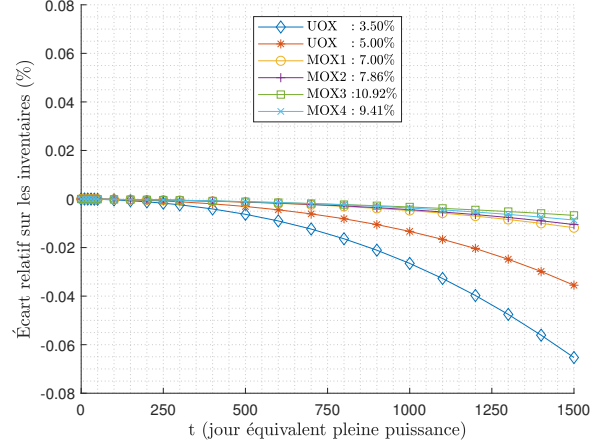
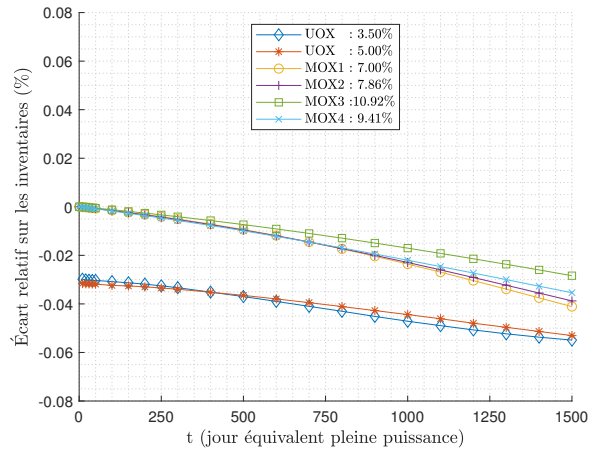
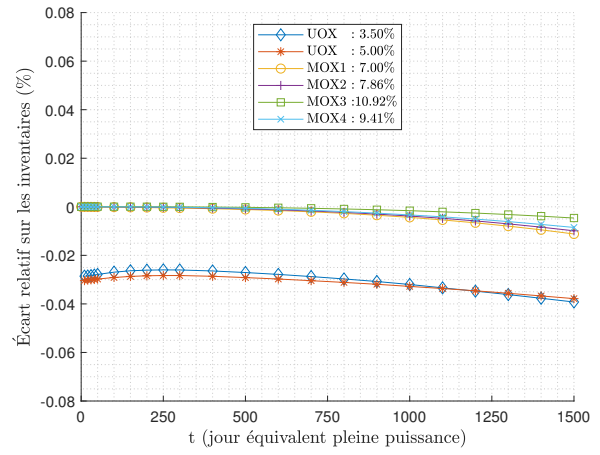
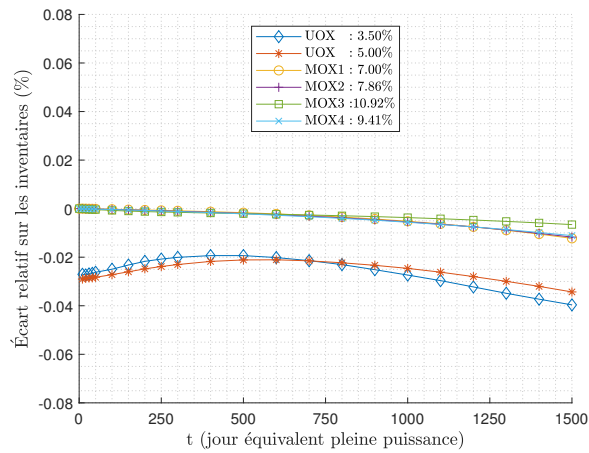
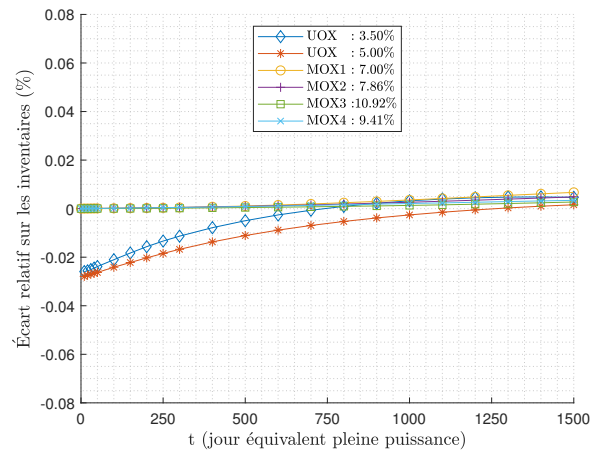
(a)  $k_{\text{eff}}$ .(b)  $^{235}\text{U}$ .(c)  $^{239}\text{Pu}$ .(d)  $^{240}\text{Pu}$ .(e)  $^{241}\text{Pu}$ .(f)  $^{242}\text{Pu}$ .

Figure 4.9 Comparaison entre des calculs d'assemblages avec autoprotection sur *tracking* SYBILT: simplifié et des calculs avec autoprotection calculée sur *tracking* SYBILT: non simplifié.

## 4.4 Étude des conditions aux limites

Le fait d'imposer une condition de réflexion isotrope ou spéculaire (voir section 3.1.6) à un impact important sur les résultats et les temps d'exécution des calculs de réseaux. Dans le cadre de ce projet, la nécessité de générer des bases de données contenant un nombre de calculs d'assemblage extrêmement important en un temps raisonnable ainsi que la nature des assemblages et des cœurs simulés ; par hypothèse les assemblages sont constitués de crayons de combustible tous identiques et les cœurs ne contiennent qu'un combustible unique également, conduisent à opter pour des conditions isotropes.

La condition de réflexion spéculaire engendre des coûts de calcul environ 40 fois supérieurs qui ne sont pas acceptables pour notre étude. Néanmoins, des études préliminaires, non présentées dans un souci de concision, montrent que les déviations sur les  $k_{\text{eff}}$  et les isotopes d'intérêt entre deux calculs différant uniquement par la nature des conditions aux limites sont relativement importantes. Sur le  $k_{\text{eff}}$  des écarts de l'ordre de 250 à 500 pcm sont mesurés. Sur les inventaires en uranium 235 dans l'UOx, des écarts relatifs inférieurs à 0.2 % sont relevés après 1500 jours équivalents pleine puissance. Les écarts sur les plutoniums sont plus conséquents dans les UOx, tout en restant limités à moins de 1% après 1500 jours équivalents pleine puissance, que dans les MOx, où ils sont au maximum de 0.4 % à ce niveau d'irradiation.

Notons que le seul juge de paix de la validité de nos calculs de réseaux est la comparaison entre les résultats obtenus avec le jeu de donnée final et les résultats obtenus pour la même situation simulée via SERPENT1. Dans la section 4.6 l'influence conjuguée de l'hypothèse de conditions de réflexion isotrope et de l'ensemble des autres simplifications et modélisations effectuées est quantifiée.

## 4.5 Étude de la discrétisation temporelle

La discrétisation temporelle (ou irradiation, ce qui est équivalent puisque nous résonnons en jour équivalent pleine puissance) est un paramètre à même d'influer grandement la précision des résultats. En effet, les assemblages de combustible neufs sont soumis à des phénomènes transitoires violents avant d'atteindre un régime d'évolution quasi linéaire en fonction de l'irradiation. Ces phénomènes, effet Xénon et effet Samarium sont évoqués plus en détail dans les sections 5.9.1 et 5.9.2 de ce document. La discrétisation retenue s'appuie sur les travaux de [25] qui porte sur le calcul d'assemblages de REP en environnement. Des pas légèrement plus fins sont adoptés afin de suivre au plus près la chute de réactivité initiale des assemblages (afin dans un second temps de prédire finement les concentrations de bore critique) et des pas plus grossiers sont adoptés après 50 jours. L'échantillonnage temporel



retenu est présenté dans le tableau 4.5. Cette discrétisation est comparée à celle effectuée par [25], des écarts inférieurs à 60 pcm et 0.05 % (relatifs) sont mesurés sur les  $k_{\text{eff}}$  et les inventaires après 1500 jours. La discrétisation ainsi déterminée retranscrit donc fidèlement la réactivité et la composition du combustible tout en permettant de simuler l'évolution des assemblages jusqu'à  $79.2 \text{ GWj.t}_{ML}^{-1}$  avec 26 calculs de transport seulement (incluant le calcul à  $t = 0$ ).

Tableau 4.5 Discrétisation temporelle pour le calcul des MULTICOMPOs.

Période considérée	$\Delta t$ (JEPP)	$\Delta BU$ ( $MWj.t_{ML}^{-1}$ )	Nombre de calculs de transport
$0 \leq t \leq 5$	2.5	90	3
$5 < t \leq 10$	5.0	180	1
$10 < t \leq 50$	10.0	360	4
$50 < t \leq 300$	50.0	1800	5
$300 < t \leq 700$	100.0	3600	4
$700 < t \leq 1600$	150.0	5400	6
$1600 < t \leq 2200$	200.0	7200	3

#### 4.6 Validation avec code Monte-Carlo et choix de la discrétisation en énergie.

Afin de conclure cette étude préliminaire portant sur le calcul de réseau il reste à valider le maillage énergétique et plus globalement l'ensemble du schéma de calcul déterministe vis-à-vis d'une exécution Monte-Carlo de référence. Plutôt que de mener d'abord une étude comparative portant uniquement sur les maillages énergétiques puis d'effectuer la validation finale par rapport aux résultats Monte-Carlo le choix est fait d'effectuer les deux opérations simultanément. Les résultats obtenus avec DRAGON5 (avec les jeux de paramètres déterminés dans les sections précédentes) sont comparés à des calculs SERPENT1 [26].

La source des données nucléaires étudiées dans le cadre de ce travail est la bibliothèque ENDF/B-VII.1. Les maillages énergétiques étudiés sont issus du traitement de ces données nucléaires par le module DRAGR : selon les travaux de [27]. Les échantillonnages étudiés sont ceux récapitulés au tableau 4.6. Le SHEM-281 correspond aux travaux de [28]. Ce raffinement à 281 groupes d'énergie est notamment utilisé dans les calculs de transport d'EDF et du CEA.

Tableau 4.6 Informations sur les bibliothèques de données nucléaires utilisées

Origine des données nucléaires	Mesh et nom pour les calculs
ENDF/B-VII.1	XMAS-172
ENDF/B-VII.1	SHEM-281

Le choix de la discrétisation énergétique est primordial, car il permet de prendre en compte des éléments majeurs de la physique nucléaire comme les absorptions particulièrement fortes des neutrons à certaines énergies. Les figures 3.1 et 4.10 présentent respectivement les sections efficaces totales des isotopes de l'uranium et du plutonium issues de la bibliothèque ENDF/B-VII.1. Sur ces figures on constate que tous les isotopes ont des sections efficaces totales significatives et de nombreuses résonances pour les énergies supérieures à quelques électrons-volts. Dans le domaine thermique ( $E < 0.625 \text{ eV}$ ) les sections efficaces de l'uranium 235 et des plutonium 239 et 241 dominent. Ceci est dû à la section efficace de fission de ces isotopes qui sont les seuls présents initialement dans le combustible à fissionner dans le domaine thermique. Les résonances principales des sections des plutoniums 239 et 241 à 0.30 et 0.25 eV respectivement, celle du plutonium 240 dans le domaine épithermique à environ 1.00 eV et celles des plutoniums 238 et 242 autour de 2.8 eV sont particulièrement visibles. Les figures 4.11 et 4.12 présentent les flux de neutrons par unité de lethargie en fonction de l'énergie, calculés avec DRAGON5 [7] dans le combustible des assemblages UOx et MOX1 avec un traitement à 172 et 281 groupes respectivement. Sur ces figures, les dépressions de flux liées aux résonances précédemment mentionnées à 0.3, 1.0 et 2.8 eV sont clairement identifiables. Sur la figure 4.11 des phénomènes autour de 7 et 11 eV sont également remarqués sans qu'il soit possible de juger de leur nature car la discrétisation est trop grossière. Sur la figure 4.12 où la discrétisation en énergie est raffinée il est possible d'y identifier des dépressions dues à des résonances. En relevant leurs énergies, 6.8 et 11.1 eV, l'uranium 238 (voir figure 3.1) peut être désigné comme en étant l'origine. L'effet des résonances des plutonium 238 et 242 à 2.8 eV est moins visible car ces isotopes sont très peu présents dans le combustible ce qui implique que le produit  $\sigma N$  est petit et donc l'impact sur le flux total faible. Ainsi seuls les isotopes du plutonium génèrent des dépressions de flux significatives dans le domaine thermique et l'uranium 238 pour des énergies légèrement supérieures. Au-delà de quelques dizaines d'eV la discrétisation en énergie adoptée est relativement grossière ce qui ne permet pas de voir l'effet d'éventuelles résonances pourtant très nombreuses. Les figures 4.11 et 4.12 montrent que le combustible UOx neuf ne présente aucune dépression notable dans le domaine thermique alors que ces dernières apparaissent et se creusent durant l'évolution avec l'apparition du plutonium. Dans le cas du MOx la dépression initialement forte liée

au plutonium 239 diminue avec la consommation de ce dernier. Une légère diminution avec l'évolution du creusement de flux lié à l'absorption par le plutonium 240 et à contrario une très légère augmentation de la dépression liée au plutonium 242 sont observées. L'ensemble de ces considérations correspond parfaitement au constat effectué par [18] selon lequel dans le MOx le plutonium 239 est consommé de manière conséquente, les plutonium 240 et 241 sont consommés à un rythme légèrement supérieur à leur production, le plutonium 238 est globalement stable et le plutonium 242 s'accumule avec l'irradiation. Dans les deux cas les dépressions liées aux résonances de l'uranium 238 sont présentes et d'intensité relativement constante entre le début et la fin de cycle, ce qui est parfaitement cohérent puisque la quantité de cet isotope varie très peu.

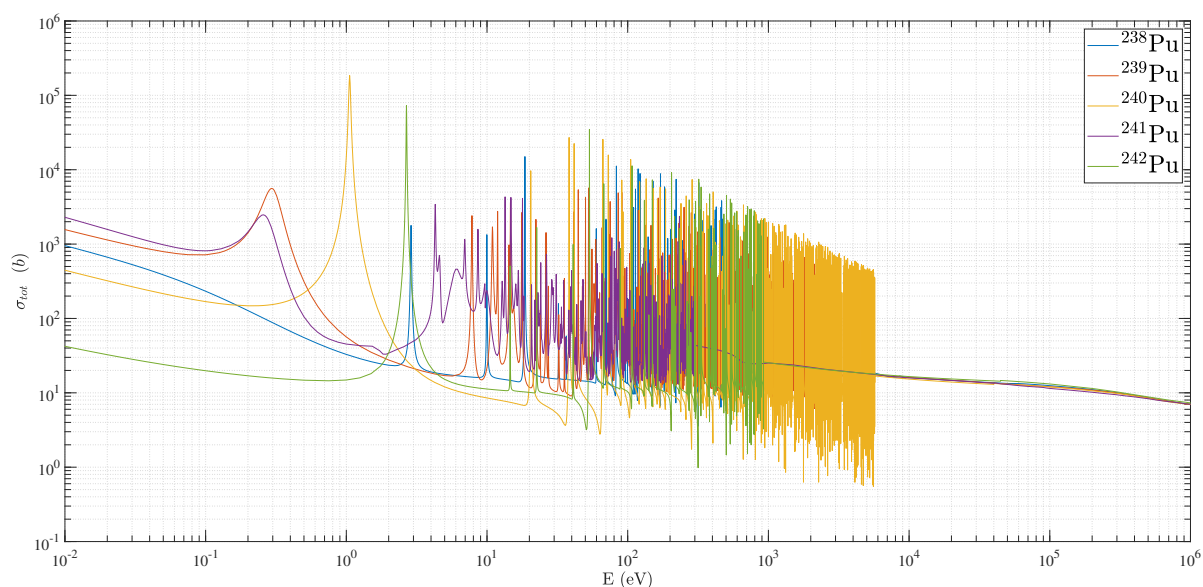
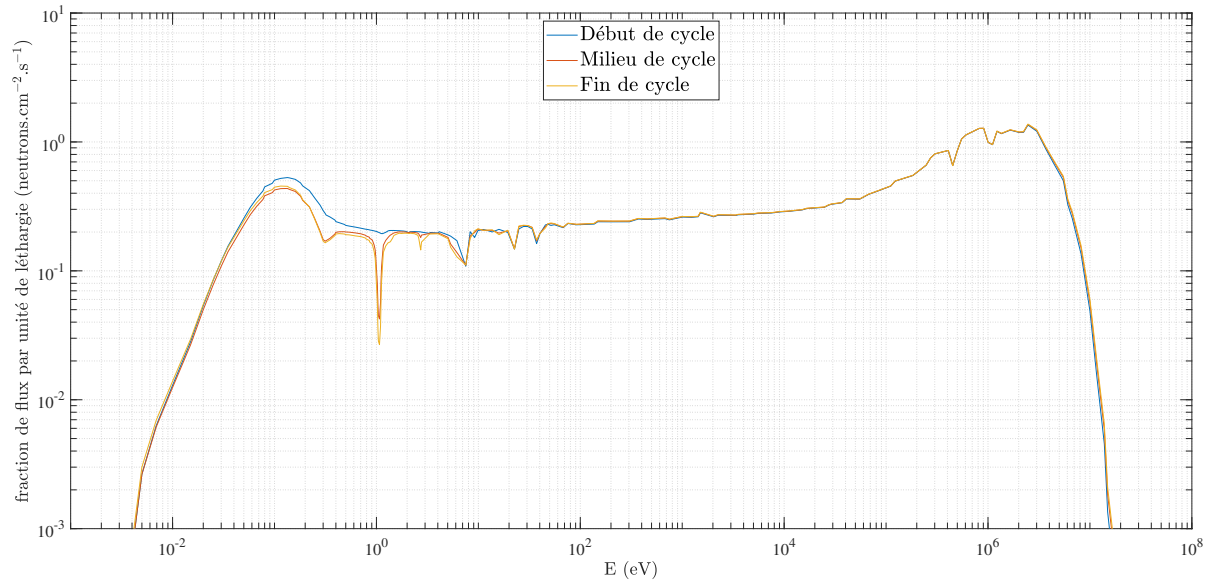
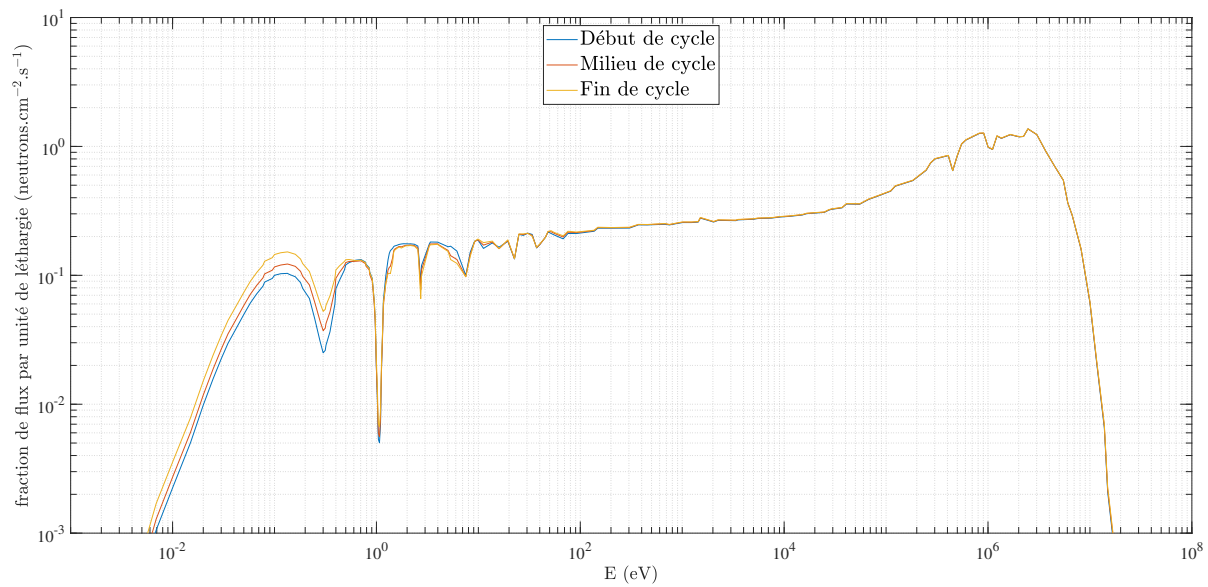


Figure 4.10 Sections efficaces totales des différents isotopes du plutonium en fonction de l'énergie ( $1 \text{ meV} < E < 1 \text{ MeV}$ ).

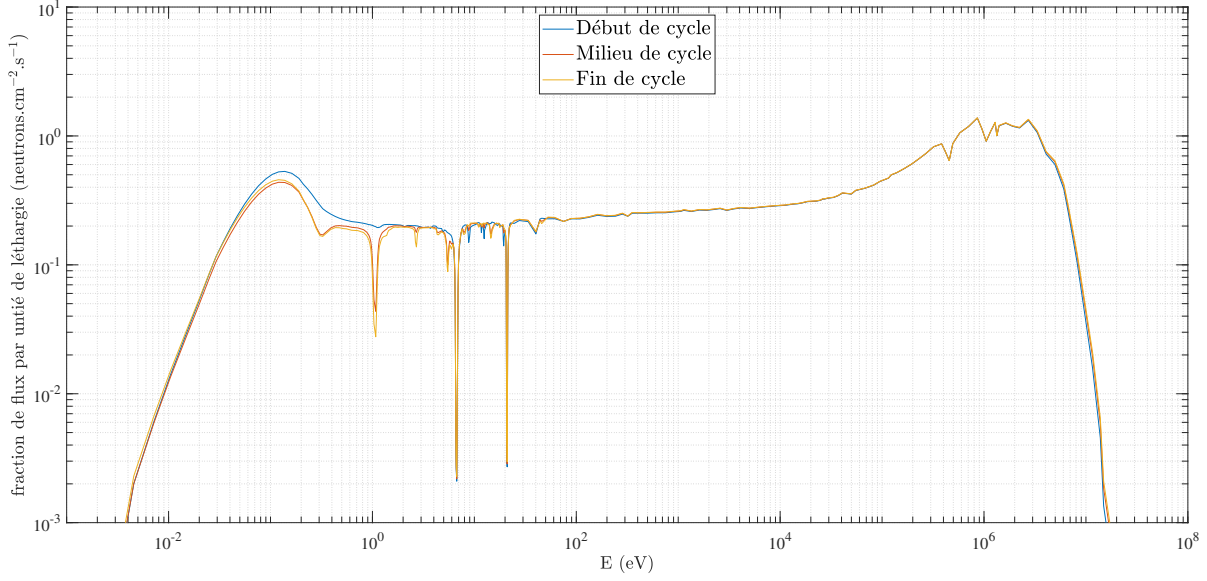


(a) Assemblage UOX1.

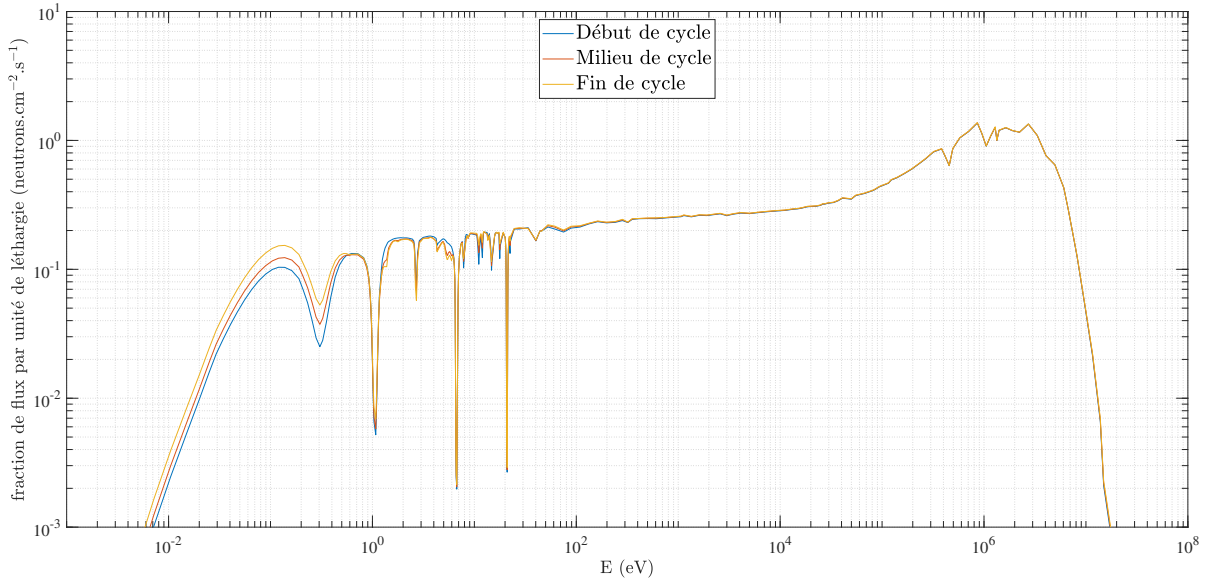


(b) Assemblage MOX1.

Figure 4.11 Distribution de flux par unité de léthargie en début de cycle ( $t = 10j$ ), milieu de cycle ( $t = 700j$ ) et fin de cycle ( $t = 1400j$ ) avec maillage XMAS172.



(a) Assemblage UOX1.



(b) Assemblage MOX1.

Figure 4.12 Distribution de flux par unité de léthargie en début de cycle ( $t = 10j$ ), milieu de cycle ( $t = 700j$ ) et fin de cycle ( $t = 1400j$ ) avec maillage SHEM281.

Le tableau 4.7 récapitule les écarts relatifs à SERPENT1 pour les quatre combustibles de référence UOX1, UOX2, MOX1 et MOX2 et pour chacune des discrétisations en énergie dans le cas d'un calcul en évolution de 1500 jours (JEPP).

Tableau 4.7 Écarts relatifs sur les  $k_{\text{eff}}$  et les inventaires isotopiques pour les combustibles UOX1, UOX2, MOX1 et MOX2 entre des calculs à 172 et 281 groupes d'énergie effectués avec DRAGON5 et les calculs de référence SERPENT1.

Calcul DRAGON5		Écart relatif maximal (%)					$\Delta k_{\text{eff}}$ (pcm)	
Cas	Mesh	$^{235}\text{U}$	$^{236}\text{U}$	$^{239}\text{Pu}$	$^{240}\text{Pu}$	$^{241}\text{Pu}$	Début cycle	Fin cycle
UOX1	XMAS-172	-0.1	0.6	-0.2	0.0	-0.8	170	20
UOX1	SHEM-281	0.5	0.2	0.2	0.6	-0.6	150	300
UOX2	XMAS-172	-1.5	0.7	-0.2	0.4	-0.6	140	-220
UOX2	SHEM-281	-1.3	0.3	0.2	0.9	-0.4	160	120
Calcul DRAGON5		Écart relatif maximal (%)					$\Delta k_{\text{eff}}$ (pcm)	
Cas	Mesh	$^{238}\text{Pu}$	$^{239}\text{Pu}$	$^{240}\text{Pu}$	$^{241}\text{Pu}$	$^{242}\text{Pu}$	Début cycle	Fin cycle
MOX1	XMAS-172	0.3	0.4	0.2	-0.3	-0.6	110	50
MOX1	SHEM-281	0.0	0.3	0.7	-0.3	-0.1	180	250
MOX2	XMAS-172	0.4	0.5	0.3	-0.2	-0.5	100	50
MOX2	SHEM-281	0.1	0.4	0.7	-0.2	0.0	170	260

L'analyse de ces résultats montre que les écarts relatifs sur les  $k_{\text{eff}}$  sont acceptables (moins de 200 pcm en début de cycle et moins de 300 pcm en fin de cycle) tout comme pour les inventaires isotopiques (moins de 1.5 % sur l'ensemble des isotopes d'intérêts après 1500 jours d'évolution). De plus, les calculs à 172 groupes s'avèrent plus proches des résultats probabilistes en ce qui concerne les  $k_{\text{eff}}$ , tandis que les écarts sur les inventaires isotopiques sont du même ordre de grandeur. Notons que notre calcul de cœur consistera dans un premier temps à calculer l'enrichissement tel que la criticité du réacteur soit assurée au moment du rechargement. Ainsi c'est le produit cumulé de l'erreur sur la réactivité par celle sur les inventaires qui importe. Cette analyse conduit à trancher en faveur du calcul à 172 groupes d'énergie ce qui permet une économie par rapport à la discrétisation à 281 groupes d'environ 40 % du temps de calcul. Il s'agit d'une manifestation claire d'un phénomène de compensation d'erreur. Celui-ci permet d'opter pour l'option la moins coûteuse tout en réduisant au minimum l'erreur relative sur les inventaires isotopiques chargés et déchargés.

Dans le cadre de ce projet on cherche à avoir un calcul réseau vraisemblable et des temps d'exécution faibles, car la finalité est de constituer des bases de données immenses (contenant plusieurs milliers de calculs réseau avec évolution). Ceci afin, dans un deuxième temps (après calcul de cœur en diffusion), de permettre d'évaluer l'effet de la prise en compte des calculs de cœur dans le code de scénario CLASS. Dans cette comparaison la première situation

consiste à interpoler la base de données DRAGON5 par des réseaux de neurones, la seconde, à interpoler cette même base de données avec DONJON5. L'erreur entre notre calcul de réseau et le calcul Monte-Carlo est à priori transparente dans la comparaison. Néanmoins, la présente étude assure que cette base de données est acceptable puisqu'elle retranscrit correctement les évolutions des réactivités et des inventaires des principaux isotopes. À défaut d'être extrêmement précise, elle est calculable en un temps raisonnable. Ceci valide le schéma de calcul établi.

## 4.7 Calcul du réflecteur

Le calcul de la composition correspondant au réflecteur est l'objet d'une modélisation particulière et nécessite la mise en œuvre d'une méthode de calcul différente. Tout d'abord, observons que contrairement aux assemblages de combustible, le réflecteur (correspondant aux divers éléments d'eau et d'acier entourant les assemblages) n'est pas homogène. En effet, il existe des zones où la jupe et la peau du réacteur sont en contact alors qu'il existe également des zones où ces deux éléments sont séparés par plus de 10 cm d'eau. Une première simplification consiste à effectuer un calcul unique pour déterminer la composition de tous les éléments cubiques représentatifs du réflecteur (qu'il soit axial ou radial, et ce quelle que soit sa position). Une seule couche d'élément cubique, d'arête  $\delta = 21.92$  cm, est considérée afin d'assurer une représentation des effets du réflecteur dans le calcul de cœur (la section 5.1 revient sur ce point). Or les différents éléments du réflecteur sont situés à une distance comprise entre 0 et 70 cm des assemblages (soit plus de trois fois la longueur modélisée). Une autre simplification consiste à calculer les sections efficaces correspondants au réflecteur uniquement à  $t = 0$ . Rigoureusement, il faudrait calculer les sections efficaces macroscopiques du réflecteur à chaque instant puisque celles-ci sont influencées par le flux qui évolue avec le combustible, mais comme le réflecteur lui-même n'évolue pas cette approximation semble légitime.

Le rayon important du cœur et sa hauteur du même ordre de grandeur permettent de justifier la modélisation du réflecteur comme une couche d'élément cubique autour des assemblages dans chacune des dimensions. Cette approximation est moins valable pour les parties hautes et basses du cœur mais, là encore, n'oublions pas que le projet consiste à étudier des inventaires d'isotopes lourds produits et consommés. Ainsi, cette approximation grossière concernant uniquement deux des multiples plans horizontaux ne paraît pas à priori dramatique.

Les dimensions du réflecteur réel constitué d'une couche d'acier appelée jupe du réacteur, d'une épaisseur d'eau, d'une seconde épaisseur d'acier appelée peau du réacteur, d'une deuxième épaisseur d'eau et enfin de la cuve et ses écrans thermiques sont résumées dans le

tableau 4.8 où les données ont été tirées des travaux de [29].

Tableau 4.8 Éléments géométriques constitutifs du réflecteur et de la cuve du cœur réel.

Élément géométrique (centre vers l'extérieur)	Épaisseur du domaine géométrique (cm)
Baffle ou jupe du réacteur	2.86
Première couche d'eau borée	5.86
Enveloppe du cœur	5.15
Deuxième couche d'eau borée	24.25
Pellicule d'inox	0.75
Cuve	20.00
Pellicule d'inox	1.04
Calorifuge	9.37

Pour le calcul transport multigroupe des sections efficaces du réflecteur une géométrie simplifiée constituée d'une succession de plaques d'eau et d'acier est utilisée. Autrement dit, la courbure des éléments en acier est supprimée. Afin d'être cohérent avec le fait que les sections utilisées sont intégrées dans un élément cubique d'arête  $\delta$  l'étude du réflecteur est limitée à la largeur d'un assemblage même si, dans l'idéal, il faudrait intégrer l'ensemble des domaines géométriques jusqu'à l'extérieur de la cuve. Les dimensions des plaques modélisées sont recensées dans le tableau 4.9. De plus, afin de modéliser correctement le flux neutronique en provenance des assemblages de combustible et ainsi calculer correctement les sections efficaces du réflecteur, il faut prendre en compte l'influence d'au moins deux assemblages de combustible d'après [29].

Tableau 4.9 Éléments géométriques retenus pour le calcul des sections efficaces du réflecteur.

Élément géométrique (centre vers l'extérieur)	Épaisseur du domaine géométrique (cm)
Baffle ou jupe du réacteur	2.86
Première couche d'eau borée	5.86
Enveloppe du cœur	5.15
Deuxième couche d'eau borée	limitée à 8.05 sur 24.25

La résolution de la forme multigroupe de l'équation du transport est, pour le réflecteur, effectuée avec les méthodes caractéristiques (voir section 3.2.3). Ceci est dû au fait que le nombre de zones traitées est trop important pour la méthode des probabilités de collision (comme



expliqué en 3.2.2). En effet, le nombre de zones spatiales est, ici, particulièrement conséquent car deux demi-assemblages ainsi que l'ensemble des zones correspondant au réflecteur sont considérés. Ceci correspond au total à l'équivalent de trois demi-assemblages ce qui représente douze fois plus de zones que le huitième d'assemblage étudié dans le calcul de réseau.

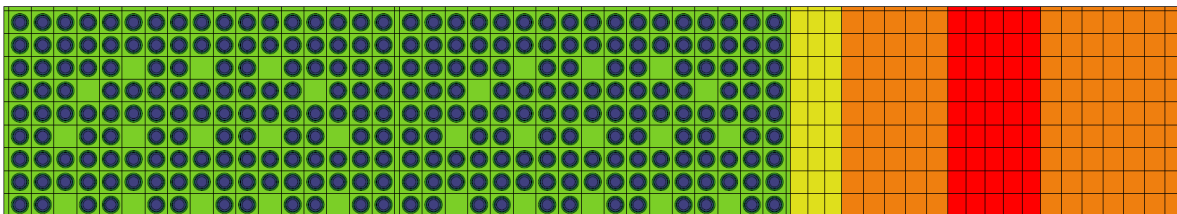


Figure 4.13 Géométrie pour le calcul de la composition du réflecteur.

Le calcul via la méthode des caractéristiques (ou méthode MOC) est très coûteux, mais envisageable dans la mesure où il est effectué uniquement à l'instant initial. Sur la figure 4.9, les éléments en acier sont représentés en jaune et rouge, les couches d'eau en orange, les crayons de combustible en bleu et l'eau présente dans les deux assemblages en vert. Enfin, précisons que dans ce calcul, compte tenu de la condition de vide imposée après le réflecteur il n'est pas possible de calculer un coefficient de fuite. Le coefficient de diffusion est déduit de la section de transport préalablement condensée à deux groupes d'énergie  $D = \frac{1}{3\Sigma_{tr}}$  [15].

#### 4.8 Exemples de résultats de calculs de réseau

Les figures 4.14 et 4.15 présentent les variations des  $k_{eff}$  et certaines densités isotopiques pour les six combustibles de référence. Le comportement très similaire des deux combustibles UOx est à noter. Pour ce qui est des MOx la composition isotopique du combustible de départ mène à d'importantes différences. Les  $k_{eff}$  ont une évolution sensiblement différente (voir le comportement du MOX3 en particulier) tout comme les plutonium 239 et 241 pour lesquels les densités volumiques correspondant aux différents calculs se croisent, car les équilibres sont déplacés en fonction de l'isotopie du combustible.

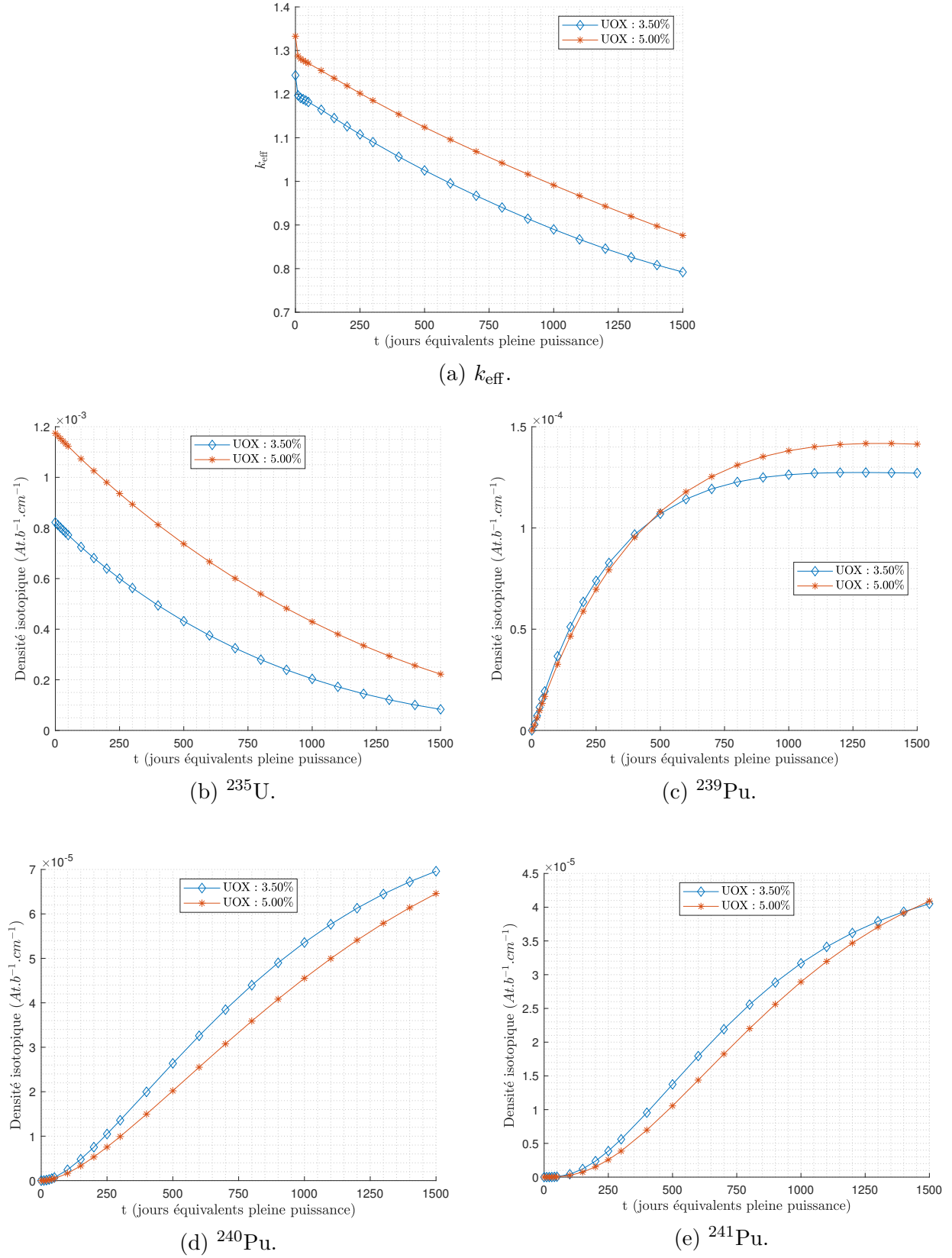


Figure 4.14 Résultats des calculs d'assemblage pour deux combustibles UOx.

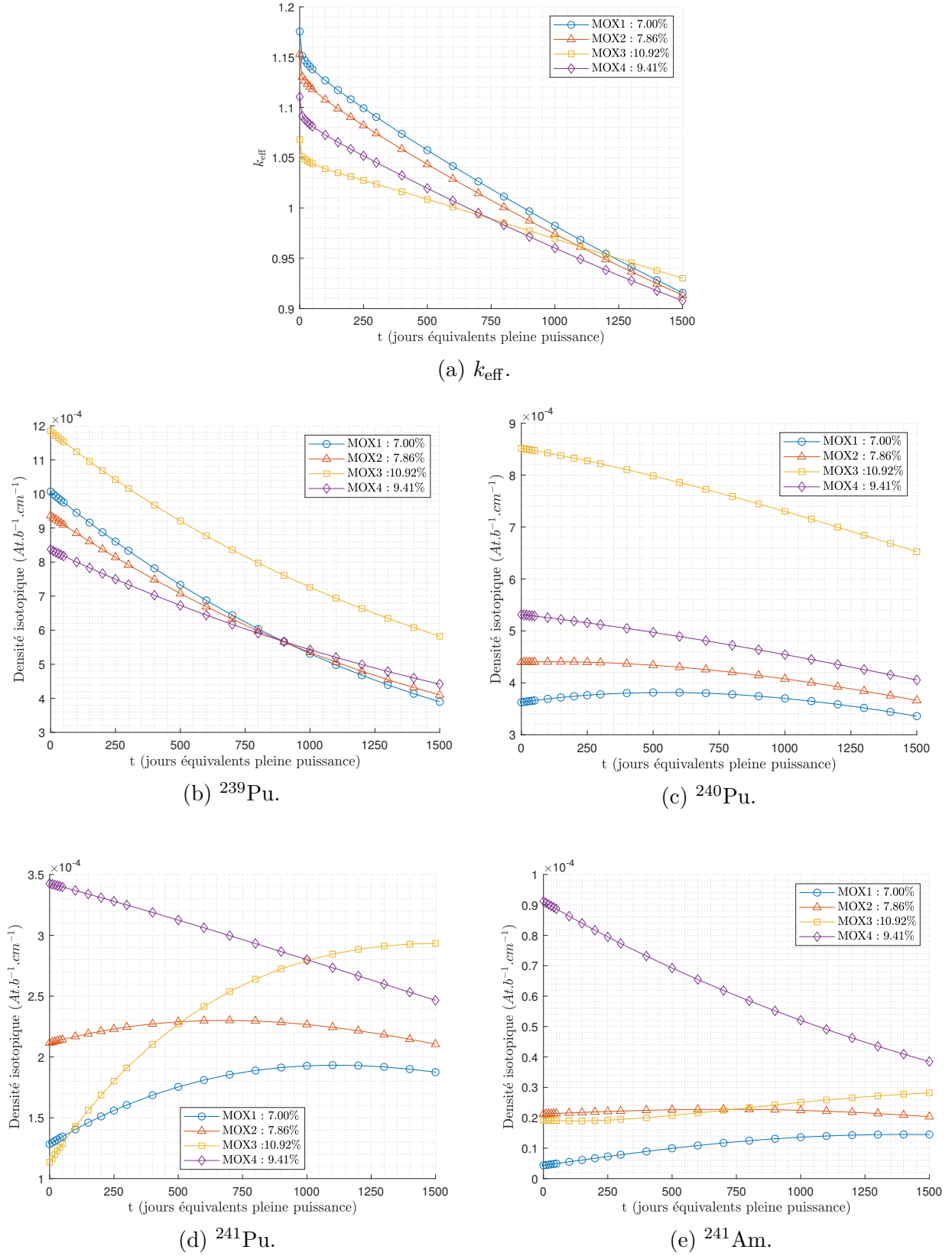


Figure 4.15 Résultats des calculs d'assemblage pour les combustibles MOx.

## CHAPITRE 5    CALCUL DE CŒUR

La résolution de l'équation du transport pour le cœur complet à trois dimensions est un problème très complexe. Il fait intervenir 157 assemblages de  $17 \times 17$  cellules ainsi que les éléments réflecteurs. La géométrie réelle du cœur étudié est représentée sur la figure 5.1. De plus, si le réseau d'assemblage est assez régulier pour qu'une analyse bidimensionnelle soit pertinente, ce n'est absolument pas le cas du calcul de cœur. La volonté d'exécuter de multiples calculs de cœurs, à trois dimensions et en évolution, au sein de notre code scénario requiert un niveau de simplification supplémentaire. Ce calcul est effectué avec DONJON5 dans l'approximation de la diffusion (voir section 3.5) et à deux groupes d'énergie avec une énergie de coupure fixée à 0.625 eV (voir section 3.3.3).

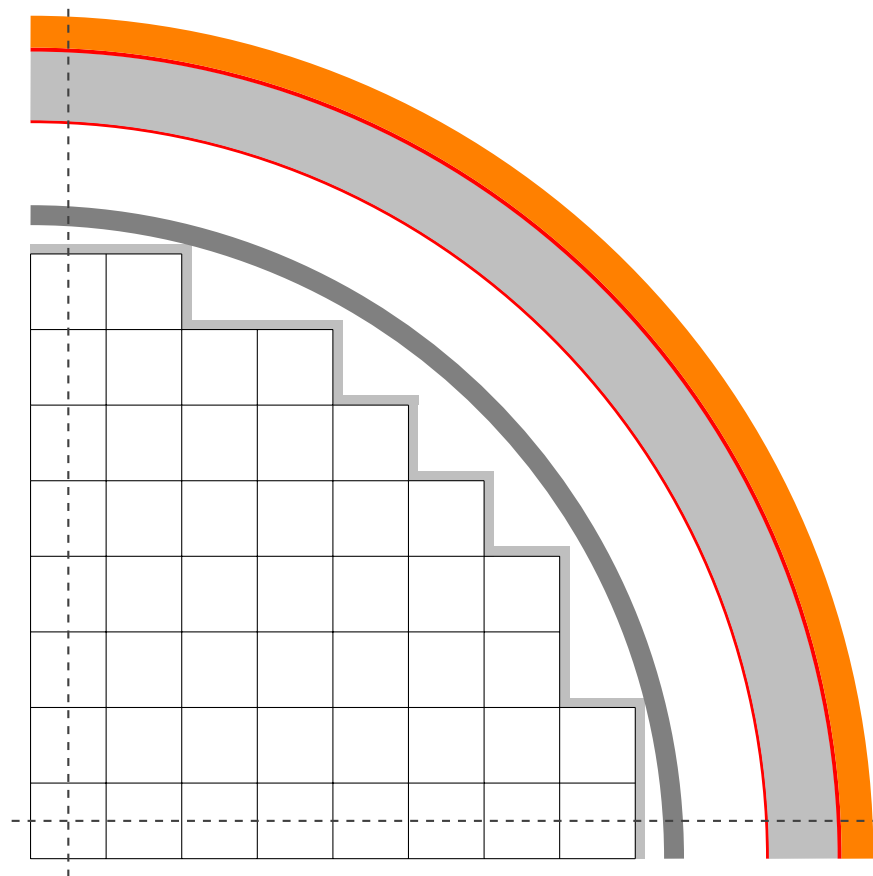


Figure 5.1 Quart de cœur réel (échelle 1/22). Sont représentés, dans l'ordre d'apparition depuis le centre : les assemblages de combustible (blanc), la jupe du réacteur (gris), la peau du réacteur (gris foncé), la cuve (gris clair) et les pellicules d'inox (rouge) ainsi que l'écran thermique (orange). Les droites pointillées indiquent les deux faces sur lesquelles sont effectuées les symétries permettant la reconstruction complète du cœur.

## 5.1 Étude de la discrétisation géométrique

La géométrie pour le calcul de cœur est simplifiée. D'abord radialement, en substituant la géométrie réelle visible sur la figure 5.1 par celle de la figure 5.2. Ce qui revient à modéliser l'ensemble des réflecteurs radiaux à travers une couche d'assemblage supplémentaire à laquelle est attribué une composition correspondant au mélange des différentes couches d'eau et d'acier le constituant (voir section 4.7). Axialement, les assemblages sont discrétisés avec un pas correspondant à celui du réseau pour le calcul de flux (le même pas est utilisé axialement, car  $17 \times \Delta$  correspond à la hauteur recherchée de 370 cm environ et cela assure un échantillonnage assez fin). Chaque assemblage est donc simulé par un empilement de 17 éléments cubiques. Les réflecteurs inférieur et supérieur sont représentés par une couche

d'élément cubique uniquement, ce qui constitue la simplification la plus grossière de notre modèle. Le cœur est ainsi représenté entièrement par des éléments cubiques d'arête  $\Delta$ .

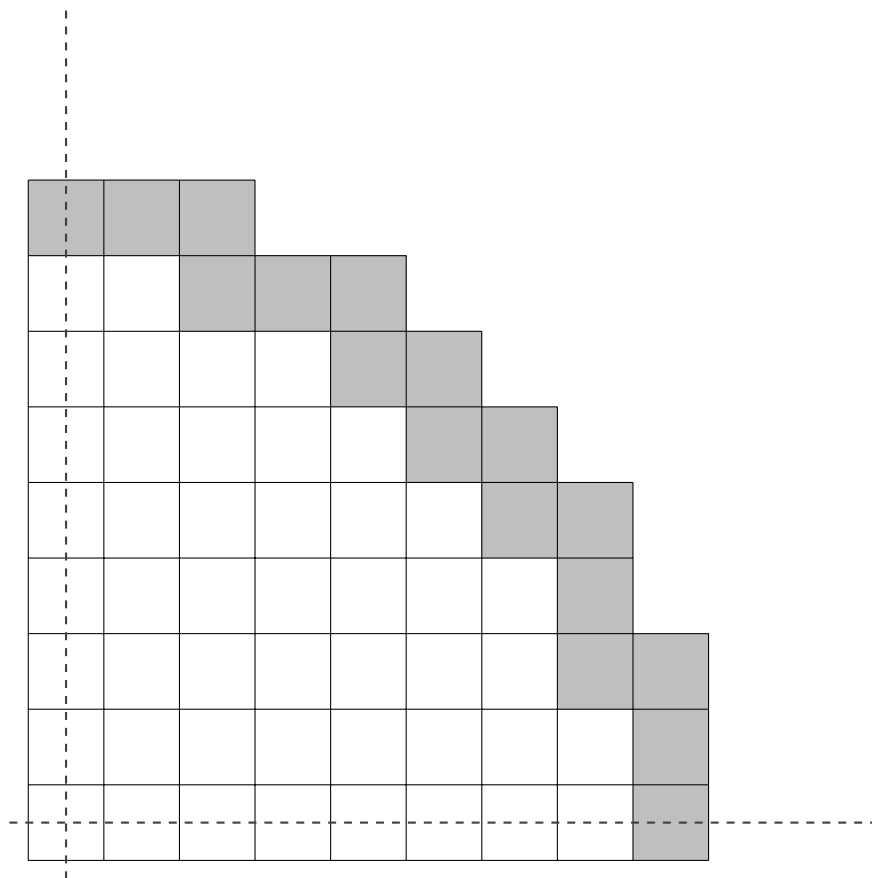
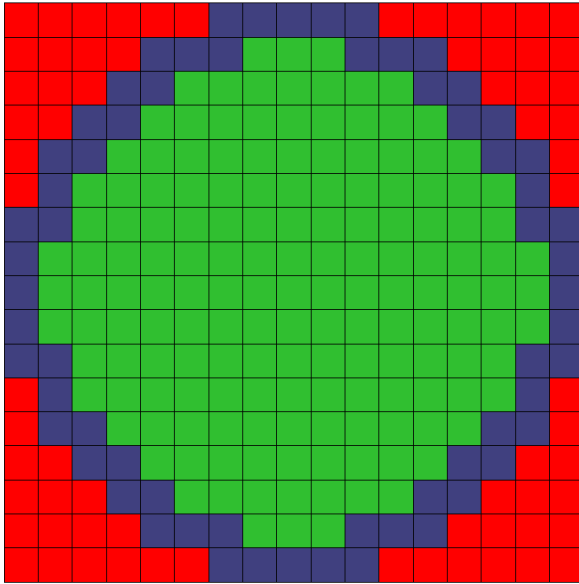


Figure 5.2 Quart de cœur simulé (échelle 1/22). Sont représentés : les assemblages de combustible (blanc) et le réflecteur (gris) pris comme une épaisseur d'assemblage à laquelle sera attribué un mélange correspondant à des successions d'eau et d'acier.

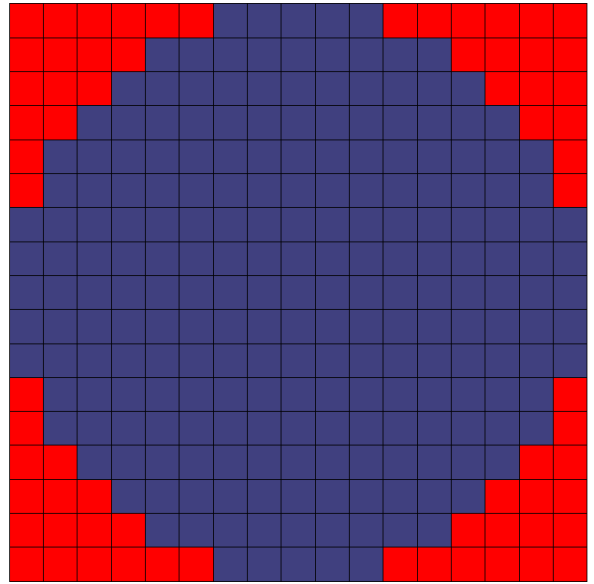
Les données géométriques employées dans ce projet, pour la géométrie du cœur, sont issues du jeu de données situé dans le répertoire DONJON5/data/rep900-proc excepté en ce qui concerne la hauteur du cœur qui a été ramenée à la hauteur classique d'environ 420 cm (qui dans le jeu de données évoqué était deux fois plus grande). Les valeurs utilisées dans la modélisation du cœur sont récapitulées au tableau 5.1.

Tableau 5.1 Données géométriques pour la simulation du cœur.

Grandeur géométrique	Valeur et unité
Hauteur totale du cœur	$19 \times \Delta = 416.48 \text{ cm}$
Hauteur des assemblages	$17 \times \Delta = 372.64 \text{ cm}$
Masse d'éléments lourds par assemblage	475.30 kg
Élément géométrique élémentaire	Cube d'arrête $\Delta = 21.92 \text{ cm}$
Nombre d'assemblages	157
Volume d'un assemblage	$\Delta \times \Delta \times 17 \times \Delta$
Réflecteur latéral	un ou deux éléments cubiques
Réflecteur axial (haut et bas)	un élément cubique



(a) Plan intermédiaire



(b) Plan supérieur et inférieur

Figure 5.3 Géométrie complète du cœur simulé. Sont visibles : les éléments correspondants au réflecteur (en bleu) et ceux correspondants au combustible (en vert).

Afin de déterminer la nécessité de discrétiser plus finement ou non la géométrie simulée (représentée sur la figure 5.3), les concentrations de bore critique en début et fin de cycle ainsi que les enrichissements pour un cycle de  $4 \times 350$  jours (voir sections 5.7 et 5.8.) sont étudiées. Ceci revient à étudier la réactivité du cœur et l'impact principal sur les inventaires isotopiques. Pour un combustible UOx, les résultats obtenus sont répertoriés dans le tableau 5.2. Les calculs ont été effectués en utilisant une représentation parabolique et une méthode

de collocation nodale pour les éléments finis. La tolérance sur les boucles de recherche de la concentration de bore critique et de l'enrichissement est fixée respectivement à 1 ppm et 0.001 %.

Tableau 5.2 Concentrations de bore critique en début de cycle et enrichissements en fonction de la discrétisation géométrique pour un calcul UOx.

Discrétisation supplémentaire		Résultats	
X & Y	Z	Bore début de cycle (ppm)	Enrichissement % $^{235}\text{U}$
2	2	1505	3.754
1	2	1511	3.747
2	1	1505	3.753
1	1	1511	3.747

L'observation des résultats montre une influence faible tant sur la réactivité du coeur (concentrations de bore critiques en début de cycle extrêmement proches) que sur les besoins en enrichissement. Entre la situation la plus discrétisée et la situation la moins discrétisée, le temps de calcul est divisé d'un facteur  $2^3 = 8$  tandis que l'erreur générée est limitée à 0.01 % pour l'enrichissement et à 6 ppm pour le bore. Ainsi, discrétiser plus finement la géométrie semble inutilement coûteux. Pour accélérer les calculs, la version la plus simple (sans discrétisation) est par conséquent adoptée.

## 5.2 Étude du *tracking*

Comme dans le cas du calcul de réseau, lors de la résolution de l'équation du transport et ce bien qu'elle ait été simplifiée avec l'hypothèse de diffusion, il est nécessaire d'établir un *tracking*. Cette étude vise à étudier les paramètres de *tracking* dans le cadre du calcul DONJON5. La durée de cycle est fixée à 350 jours équivalents pleine puissance et la validité du *tracking* est établie en observant l'impact sur l'enrichissement et la concentration de bore en début de cycle. Deux méthodes d'éléments finis différentes sont testées : les méthodes mixte duale et de collocation nodale.



Tableau 5.3 Concentrations de bore critique en début de cycle et enrichissements en fonction des paramètres de *tracking* pour un cœur UOx.

Méthode mixte duale		Résultats	
Représentation	Quadrature	Bore début de cycle (ppm)	Enrichissement % $^{235}\text{U}$
Parabolique	Gauss-Legendre	1508	3.749
Parabolique	Gauss-Lobatto	1511	3.747
Parabolique	Analytique	1508	3.753
Linéaire	Analytique	1553	3.691
Méthode de collocation nodale		Résultats	
Parabolique		1511	3.747
Linéaire		1853	3.558

Les résultats, présentés dans le tableau 5.3, montrent que l'on peut se limiter à une méthode de collocation nodale avec représentation parabolique. Les erreurs générées, comparativement au cas de référence (méthode mixte duale parabolique et quadrature de Gauss-Legendre), sont ainsi inférieures à 0.002 % sur les enrichissements et inférieures à 4 ppm sur la concentration de bore critique en début de cycle. Cette méthode s'avère également bien plus rapide qu'une méthode mixte duale avec représentation parabolique et quadrature Gauss-Lobatto assurant le même niveau de précision.

### 5.3 Étude des paramètres pour le calcul de flux

Le calcul de flux est effectué dans DONJON5 via l'appel au module FLUD:. Une méthode ADI (alternating direction implicit) est utilisée avec un nombre d'itération interne par itération externe égal à un ou deux. Des tests sont effectués avec chacune de ces valeurs. Dans les deux cas le nombre maximal d'itérations externes est fixé à 75 selon les recommandations de la notice technique de TRIVAC [30]. Les résultats obtenus en termes de réactivité du cœur et d'enrichissement sont rigoureusement identiques (déviations de moins de 0.00001 % sur les enrichissements et moins de 0.01 ppm pour la concentration de bore critique). La version la plus économe est donc conservée dans la suite du projet, à savoir une unique itération interne par itération externe. Cela permet une économie d'environ 40 % du temps de calcul.

## 5.4 Étude de la discrétisation temporelle

Le calcul de cœur en évolution est effectué avec une discrétisation temporelle à déterminer. Il est important de raffiner les premiers pas de calcul afin notamment de prendre en compte l'établissement de l'équilibre du xénon 135 après le rechargement. Pour ce faire, les itérations correspondant à 0, 2.5, 5 et 10 jours sont fixées. Pour les itérations suivantes, le nombre de nœuds de calcul est réduit au minimum afin de limiter le temps d'exécution. Le tableau 5.4 présente les déviations sur les concentrations isotopiques de l'uranium 235 et des isotopes du plutonium au moment du rechargement en fonction des différentes discrétisations temporelles pour un combustible UOx. Dans cette situation comparer les enrichissements et la concentration de bore à  $t = 0$  n'est pas utile puisque ce ne sont pas des fonctions du pas de temps. La proposition médiane engendrant un coût de calcul environ 30 % inférieur à celle pour laquelle les pas de temps sont le plus finement discrétisés est adoptée. Les écarts sur les enrichissements restent ainsi, inférieurs à 0.1 % (relatifs).

Tableau 5.4 Écart relatif (%) sur les inventaires au moment du déchargement (après quatre cycles simulés) en fonction des paramètres de discrétisation temporelle pour un cœur UOx.

Discrétisation (jours)		Déviation relative (%)					
$10 < t \leq 50$	$50 < t \leq 350$	$^{235}\text{U}$	$^{238}\text{Pu}$	$^{239}\text{Pu}$	$^{240}\text{Pu}$	$^{241}\text{Pu}$	$^{242}\text{Pu}$
10.0	100.0	0.24	-0.13	0.02	-0.04	-0.03	-0.15
10.0	50.0	0.09	-0.06	-0.00	-0.02	-0.02	-0.06
5.0	20.0	ref	ref	ref	ref	ref	ref

## 5.5 Étude de la méthode d'interpolation

Le calcul de cœur repose sur l'interpolation à chaque noeud de calcul des sections efficaces macroscopiques à deux groupes d'énergie contenues dans l'objet MULTICOMPO. Pour effectuer cette interpolation, différentes options sont disponibles. Une méthode linéaire utilisant des polynômes de Lagrange, ou encore une méthode cubique basée sur des polynômes de Hermite [31], peuvent être adoptées. Afin de trancher sur l'utilisation de l'une ou l'autre de ces méthodes, des calculs comparatifs sur des MULTICOMPO UOx et MOx sont menés. Pour ces calculs le pas temporel correspond à la proposition médiane de la section précédente. La méthode d'éléments finis est une méthode de collocation nodale avec représentation parabolique et aucune discrétisation géométrique supplémentaire n'est ajoutée.

Tableau 5.5 Écart relatif (%) sur les inventaires au moment du rechargement en fonction des méthodes numériques d'interpolation et des pas d'enrichissement de la MULTICOMPO pour un cœur UOx.

$\Delta$ Enrichissement	0.125 %		0.250 %		0.500 %		1.000 %	
Isotope	$^{235}\text{U}$	$^{239}\text{Pu}$	$^{235}\text{U}$	$^{239}\text{Pu}$	$^{235}\text{U}$	$^{239}\text{Pu}$	$^{235}\text{U}$	$^{239}\text{Pu}$
(Linéaire-Réf) / Réf (%)	0.73	-0.17	0.80	-0.17	1.39	-0.17	3.17	-0.14
(Cubique-Réf) / Réf (%)	réf	réf	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.04

Les résultats présentés dans le tableau 5.5 montrent que l'utilisation d'une méthode d'interpolation linéaire plutôt que cubique engendre un écart sur les inventaires de 0.71 % dans le cas d'un calcul de la MULTICOMPO effectué avec un pas d'enrichissement de 0.125 %, cette erreur augmente avec le pas pour atteindre 3.17 % dans le cas d'une discrétisation de 1.00 % sur l'enrichissement. Dans tous les cas, cet écart est trop important. À contrario, la méthode cubique assure des écarts faibles, quelle que soit la discrétisation en enrichissement choisie (entre 0.125 % et 1.00 %). Afin de limiter la taille de l'objet MULTICOMPO (et le temps de calcul permettant de le générer) un pas de 1.00 % et une méthode d'interpolation cubique sont retenus. Ceci assure une précision supérieure à 0.1 % (relatifs) sur les interpolations ce qui est tout à fait acceptable.

## 5.6 Étude du plan de rechargement

Pour les données de rechargement, ce travail s'est appuyé sur le plan de rechargement utilisé dans l'exemple REP900 du répertoire data de DONJON5. La gestion des rechargements et les permutations entre assemblages est effectué pour l'ensemble de ce projet avec le module SIM: [32] de DONJON5. Dans le cas du combustible UOx celui-ci est représenté sur la figure 5.4. Sur cette figure, les assemblages ayant déjà effectué trois cycles complets en cœur sont représentés en jaune, ceux ayant effectués deux cycles complets en vert foncé, ceux ayant effectué un cycle complet en vert clair, les assemblages neufs en bleu clair et le réflecteur en bleu foncé. La cohérence physique des plans de rechargement proposés est à souligner. Les assemblages les plus usés sont disposés sur les positions proches de la cuve afin de limiter la fluence. De plus, le nombre d'assemblages décroît avec le nombre de cycles, 40 assemblages neufs sont introduits à chaque rechargement, 40 assemblages ayant effectué un et deux cycles sont déplacés, 37 assemblages ayant effectué trois cycles sont déplacés et trois assemblages sont déchargés au bout de trois cycles seulement. Pour les combustibles MOx un plan de chargement distinct a été élaboré. Celui-ci respecte la même logique physique, mais présente

des différences notables visibles sur la figure 5.4, il permet, entre autres, de conserver un facteur de forme correct.

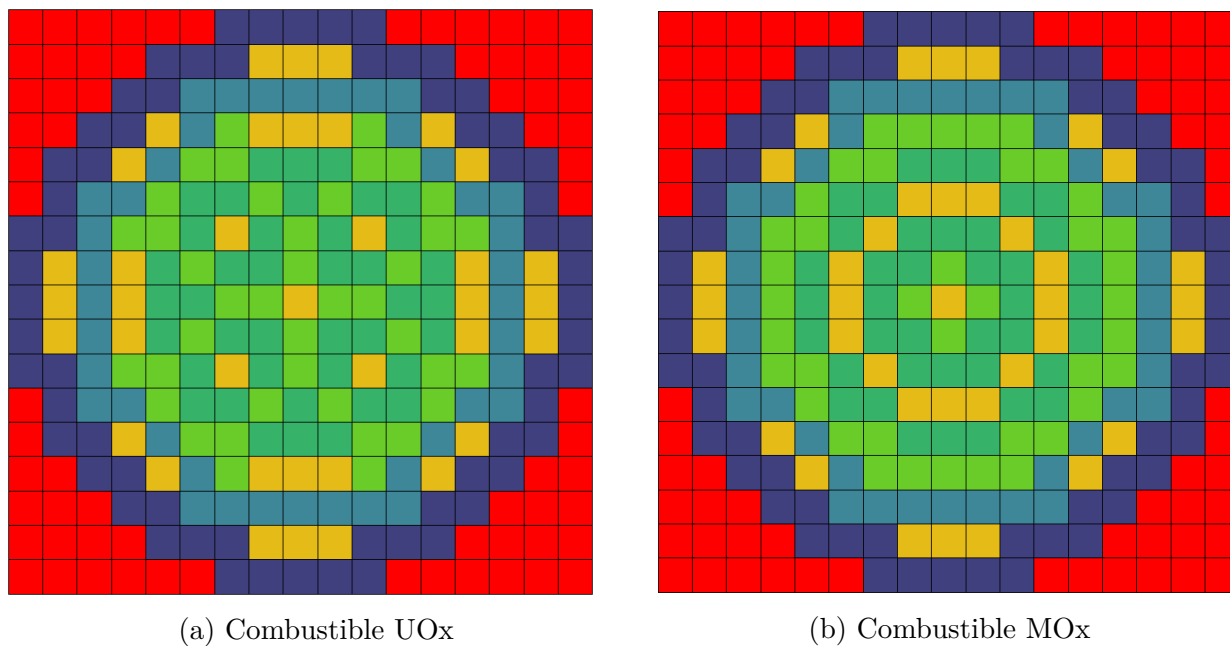


Figure 5.4 Plans de rechargement des réacteurs UOx et MOx : en bleu foncé le réflecteur, en jaune les assemblages ayant déjà effectué trois cycles, en vert clair les assemblages ayant déjà effectué deux cycles, en vert foncé les assemblages ayant déjà effectué un cycle et en bleu clair les assemblages neufs.

Un autre travail important a consisté à établir un plan de permutation pour chacun des combustibles (puisque les plans de chargement sont eux-mêmes différents). Les plans de permutation retenus pour ce projet sont présentés sur la figure 5.5 (notons que pour le MOx, les plans de chargement et de permutation sont fixés, quelle que soit la qualité isotopique du combustible).

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O
01							E07	H07	K07						
02					NEW	NEW	NEW	NEW	NEW	NEW	NEW				
03				F03	NEW	F07	D06	L05	L06	J07	NEW	J03			
04			C06	NEW	G07	F05	E02	B08	K02	J05	I07	NEW	M06		
05		NEW	NEW	E08	B07	C05	D07	L04	L07	M05	N07	H05	NEW	NEW	
06		NEW	G06	E06	E03	E04	F02	E05	J02	D05	K03	K06	I06	NEW	
07	G05	NEW	F04	B05	G04	B06	G02	D08	I02	N06	I04	N05	J04	NEW	I05
08	G08	NEW	K04	H02	D04	K05	H04	F08	H12	K11	D12	H14	K12	NEW	I08
09	G11	NEW	F12	B11	G12	B10	G14	L08	I14	N10	I12	N11	J12	NEW	I11
10		NEW	G10	E10	E13	D11	F14	E11	J14	E12	K13	K10	I10	NEW	
11		NEW	NEW	K08	B09	C11	D09	L12	L09	M11	N09	H11	NEW	NEW	
12			C10	NEW	G09	F11	E14	N08	K14	J11	I09	NEW	M10		
13				F13	NEW	F09	D10	L11	L10	J09	NEW	J13			
14					NEW	NEW	NEW	NEW	NEW	NEW	NEW				
15							E09	H09	K09						

(a) Combustible UOx

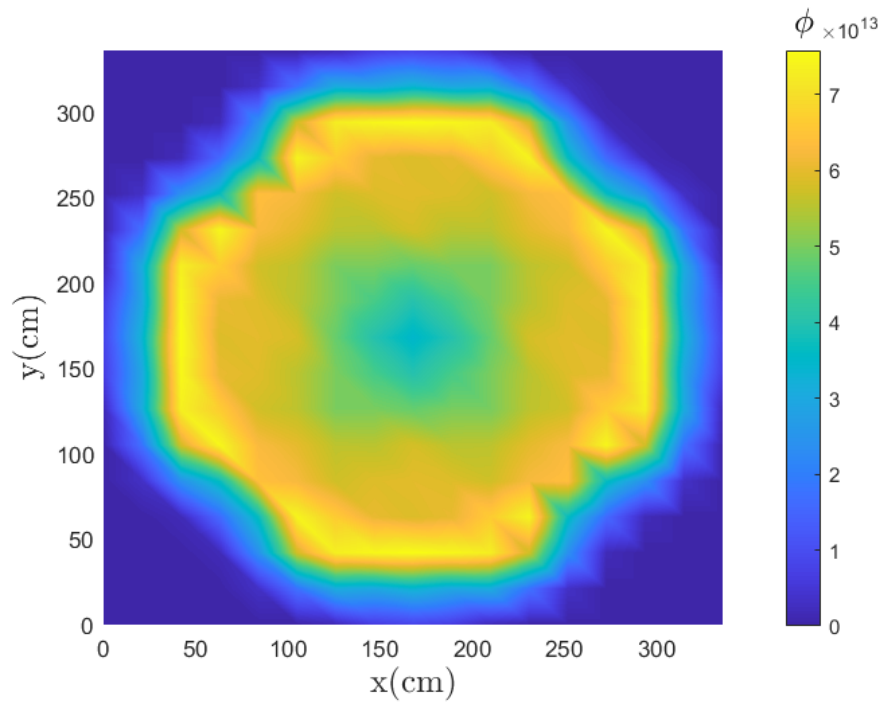
	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O
01							G03	H07	I03						
02					NEW	NEW	NEW	NEW	NEW	NEW	NEW				
03				F04	NEW	D08	G04	F08	I04	H04	NEW	J04			
04			D06	NEW	F07	F05	E02	B08	K02	J05	J07	NEW	L06		
05		NEW	NEW	G06	F02	C05	E04	M06	K04	M05	B06	I06	NEW	NEW	
06		NEW	G07	E06	E03	F03	G02	N06	I02	J03	K03	K06	I07	NEW	
07	C07	NEW	D07	B05	D05	B07	D04	E05	L04	N07	L05	N05	L07	NEW	M07
08	G08	NEW	H06	H02	C06	J02	K05	H03	K11	J14	C10	H14	H10	NEW	I08
09	C09	NEW	D09	B11	D11	B09	D12	E11	L12	N09	L11	N11	L09	NEW	M09
10		NEW	G09	E10	E13	F13	G14	N10	I14	J13	K13	K10	I09	NEW	
11		NEW	NEW	G10	F14	C11	E12	M10	K12	M11	B10	I10	NEW	NEW	
12			D10	NEW	F09	F11	E14	N08	K14	J11	J09	NEW	L10		
13				F12	NEW	L08	G12	J08	I12	H12	NEW	J12			
14					NEW	NEW	NEW	NEW	NEW	NEW	NEW				
15							G13	H09	I13						

(b) Combustible MOx

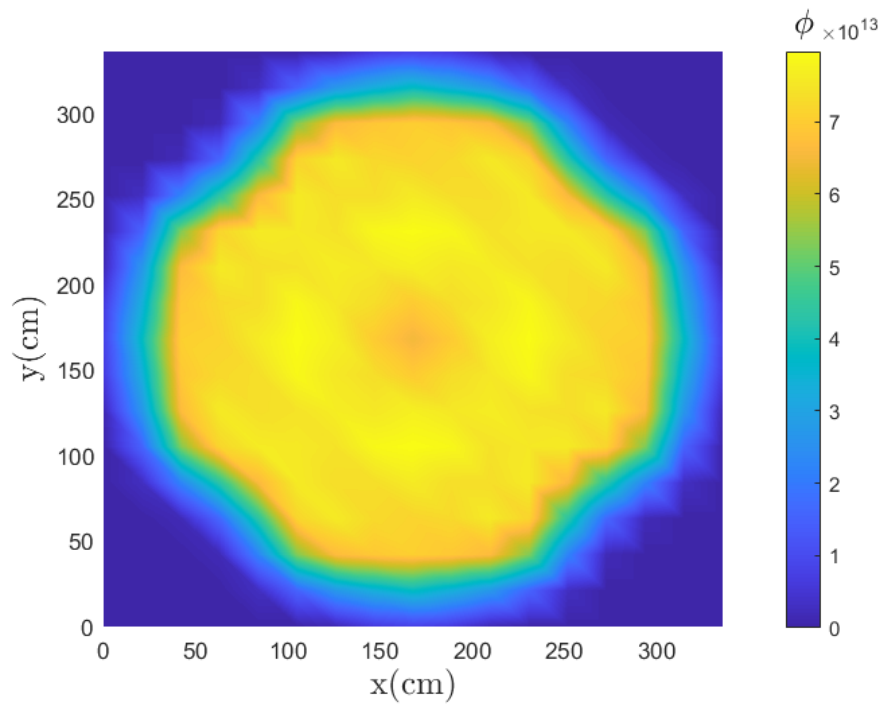
Figure 5.5 Plans de permutation des assemblages. La position antérieure des assemblages est repérée par ses coordonnées navales (A-O, 01-15).

### 5.6.1 Nécessité de différencier les plans de chargement UOx et MOx

Dans le cas du combustible UOx simulé, le flux thermique, représenté sur les figures 5.6a et 5.6b, présente exactement l'allure attendue. La valeur typique de  $8 \times 10^{13}$  neutrons.cm<sup>-2</sup>.s<sup>-1</sup> est relevée pour flux thermique (au centre du cœur). Pour le flux rapide (non représenté) une valeur également en accord avec la littérature de  $5 \times 10^{14}$  neutrons.cm<sup>-2</sup>.s<sup>-1</sup> est notée (au centre du cœur). De plus, sur les figures 5.7a et 5.7b les profils de flux sont sensiblement identiques que l'on se positionne au milieu du cœur ou bien dans le réflecteur, mais l'amplitude est considérablement diminuée dans ce dernier ce qui est recherché.

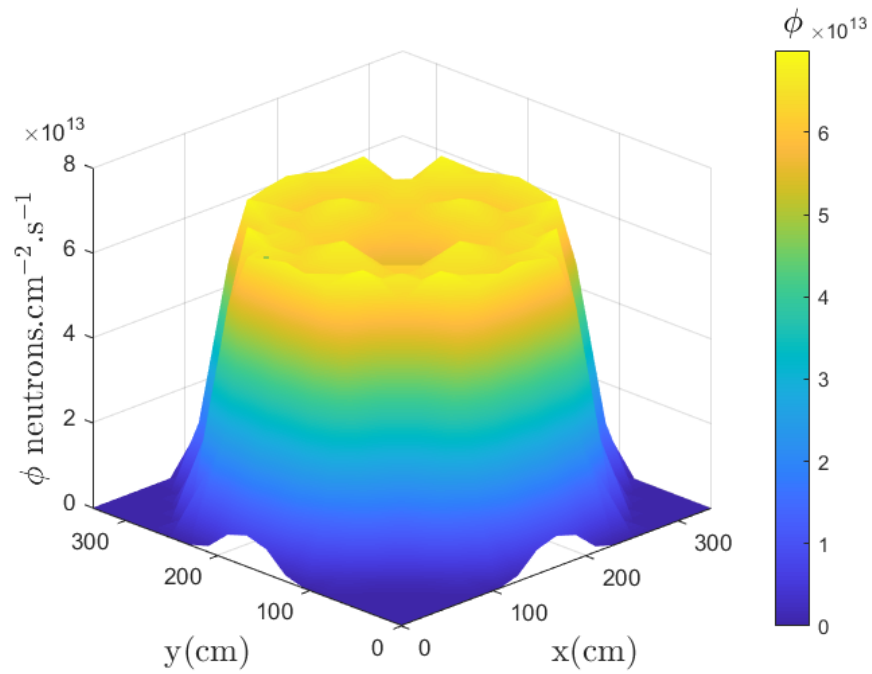


(a)  $t = 50$  jours (JEPP).

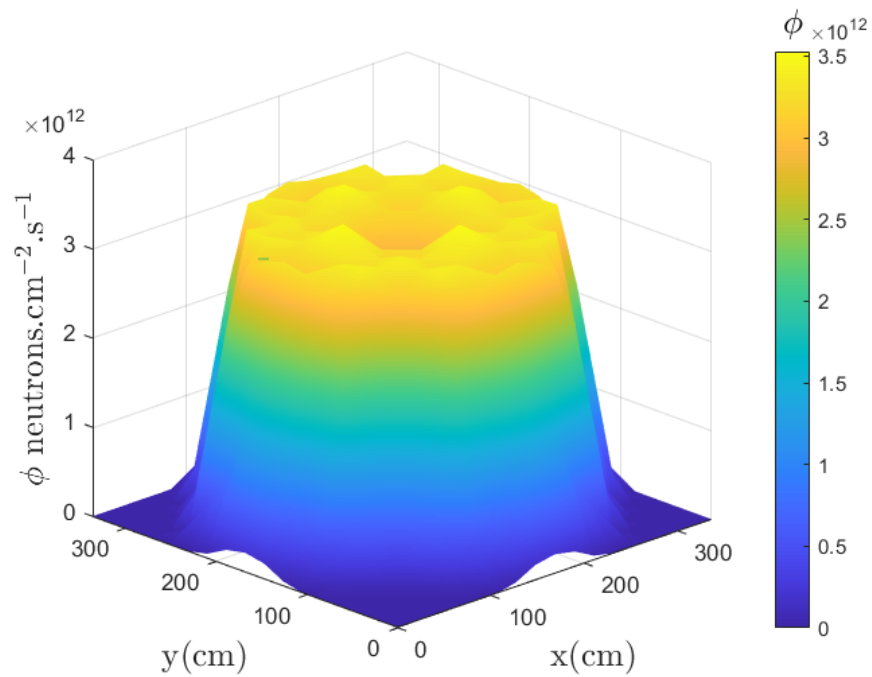


(b)  $t = 350$  jours (JEPP).

Figure 5.6 Nappe de flux thermique dans le plan médian (horizontal) du cœur à différents instants pour un combustible UOx enrichi à 4.00 % .



(a) Plan médian



(b) Réflecteur inférieur

Figure 5.7 Nappe de flux thermique dans le cœur après  $t = 150$  jours équivalents pleine puissance pour un combustible UOx enrichi à 4.00 %.



Pourquoi ne pas avoir choisi un plan de rechargement unique, valable quelle que soit la nature du combustible utilisé dans le cœur ? Une étude rapide du flux neutronique a montré que le plan de chargement adapté à l'UOx et assurant un facteur de forme de l'ordre de 1.25 après 50 jours (équivalents pleine puissance) et 1.17 après 350 jours conduisait à des résultats sensiblement différents pour le combustible MOx avec des facteurs de forme de respectivement 1.57 et 1.28 aux mêmes instants. Le facteur de forme est défini via l'équation 5.1.

$$\text{Facteur de forme} = FF = \frac{\Phi_{max}}{\Phi_{moy}} \quad (5.1)$$

Ce constat était attendu, les travaux de [33] et [17] détaillent à quels points un certain nombre de paramètres primordiaux varient quand on passe d'un cœur entièrement UOx à un cœur entièrement MOx et en particulier le durcissement du flux neutronique associé à ce changement de combustible. La figure 5.8, illustre cet effet de flux et montre au passage la très grande similarité avec les travaux de [33].

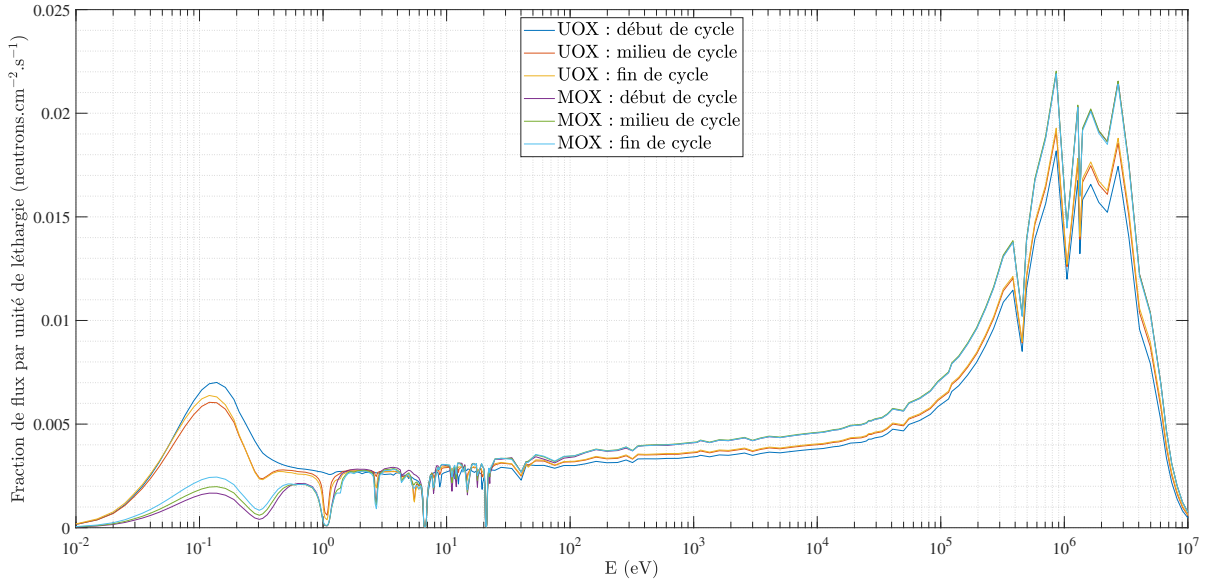


Figure 5.8 Fraction de flux neutronique par unité de lethargie en fonction de l'énergie pour des assemblages UOx et MOX2 (calcul à 281 groupes).

Pour contourner cette difficulté, un plan de rechargement spécifique au combustible MOx a été développé sur la base de celui créé précédemment. Ce nouveau plan de rechargement se différencie de celui pour l'UOx par un mouvement des assemblages les plus usés situés sur la cinquième couronne de combustible vers la troisième couronne de combustible.

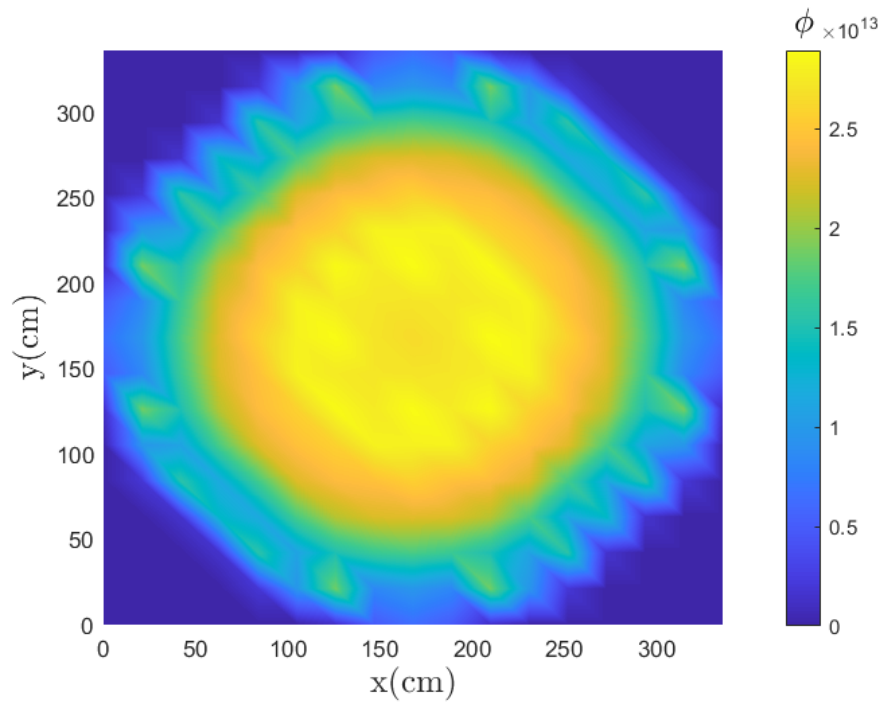
Sur les figures 5.9a et 5.9b sont représentés les flux thermiques obtenus pour un cœur conte-

nant uniquement des assemblages de MOx mais qui aurait été rechargé avec le plan de rechargement UOx. Le flux est très piqué au centre du cœur ce qui se traduit notamment dans le facteur de forme. Les figures 5.10a et 5.10b représentent, quant à elles, le flux obtenu dans le cas du plan de rechargement adapté au combustible MOx. Un net redressement du flux en périphérie, qui se traduit par un facteur de forme de 1.40 après 50 jours (équivalents pleine puissance) et 1.19 après 350 jours soit des valeurs relativement proches de celles obtenues pour l’UOx est ici observé.

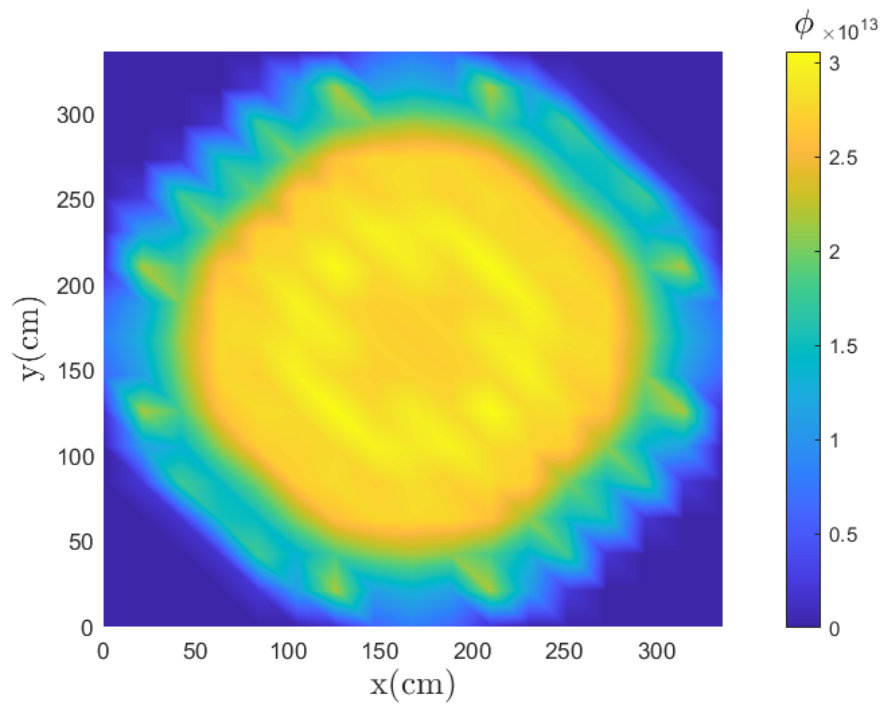
Une fois intégrées les multiples adaptations quant à la nature du combustible précédemment évoquées, les facteurs de formes mesurés avec des cœurs chargés avec les six combustibles de référence sont répertoriés au tableau 5.6. Dans ce tableau, pour l’UOx des résultats très satisfaisants sont observés avec des valeurs classiques pour le facteur de forme et un aplatissement relativement rapide de la nappe de flux. Pour le MOx, les facteurs de formes sont plus élevés tout en restant satisfaisants. Notons que les combustibles MOX3 et dans une moindre MOX4 correspondent à des compositions peu vraisemblables. Ces cas sont considérés uniquement afin d’assurer que la simulation couvre l’éventail des situations possibles. Il est raisonnable de penser que ces compositions ne seront jamais atteintes dans un scénario cohérent. Les résultats montrent qu’en pareil cas les valeurs associées de facteur de forme bien qu’au-delà des standards restent néanmoins raisonnables. Notons également que les simulations de cœur ici évoquées ne prennent aucunement en compte des dispositifs tels que les barres de contrôle.

Tableau 5.6 Facteur de forme radial (plan médian) à différents instants pour des réacteurs chargés entièrement avec chacun des combustibles de référence pour le flux rapide.

t (JEPP)	10	50	150	350
UOx	1.33	1.26	1.17	1.17
MOX1	1.26	1.24	1.22	1.16
MOX2	1.38	1.39	1.30	1.19
MOX3	1.79	1.76	1.60	1.36
MOX4	1.62	1.58	1.42	1.24

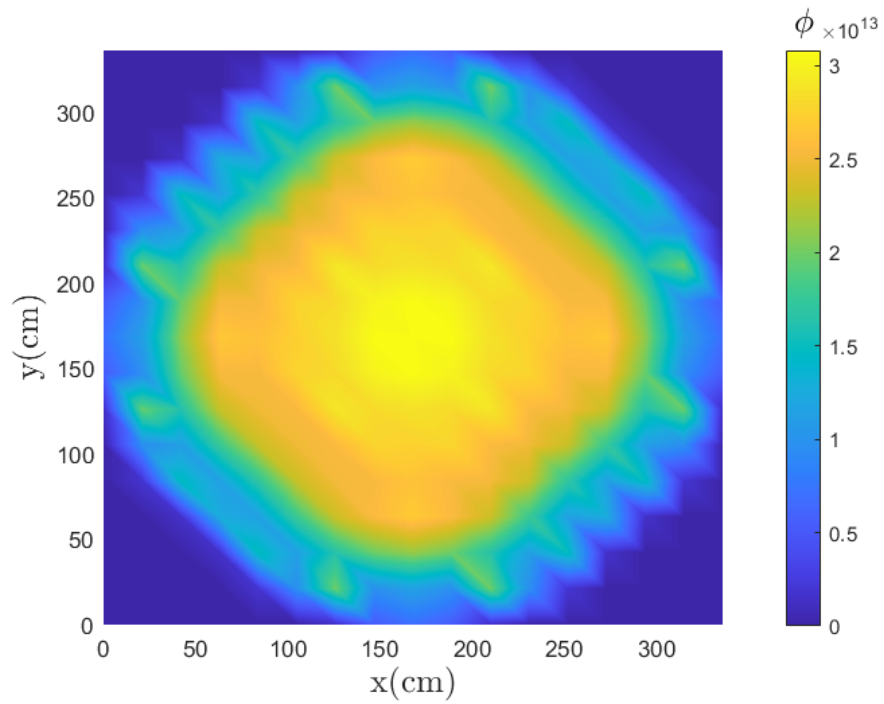


(a)  $t = 50$  jours (JEPP).

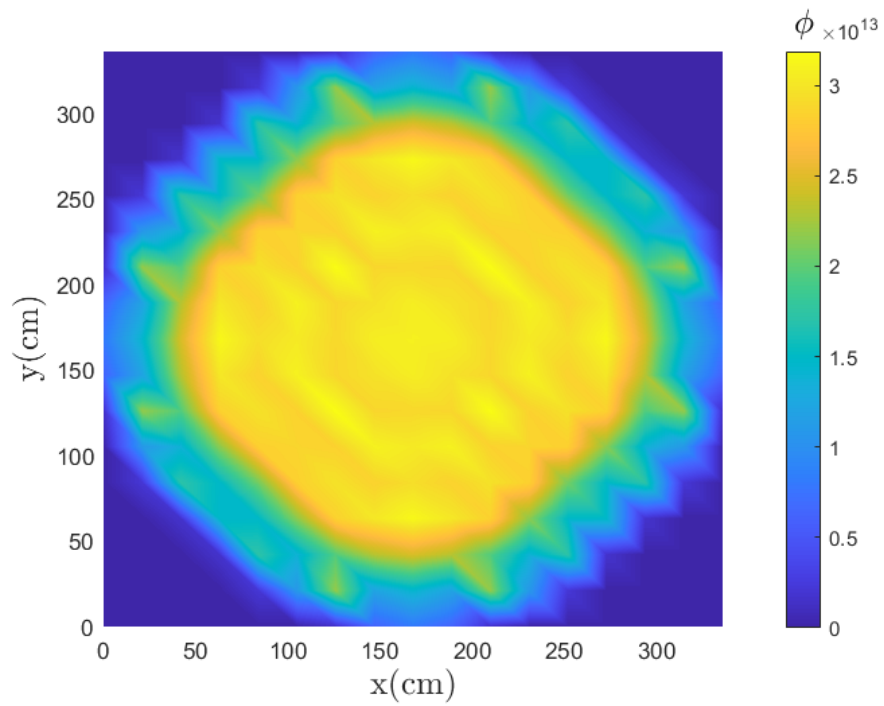


(b)  $t = 350$  jours (JEPP).

Figure 5.9 Nappe de flux thermique dans le plan médian (horizontal) du cœur à différents instants pour un combustible MOX2 enrichi à 7.80 % avec plan de rechargement UOx.



(a)  $t = 50$  jours (JEPP).



(b)  $t = 350$  jours (JEPP).

Figure 5.10 Nappe de flux thermique dans le plan médian (horizontal) du cœur à différents instants pour un combustible MOX2 enrichi à 7.80 % avec plan de rechargement MOx.

### 5.6.2 Prédiction des burnups au moment du rechargement

Les données de référence n'incluaient pas de données de burnup fines pour les assemblages ayant déjà effectué un, deux ou trois cycles en cœur au moment du rechargement ni des permutations effectuées entre les différents assemblages au sein du cœur à chaque rechargement. Les valeurs uniformes de  $13, 26$  et  $39 \text{ GWj.t}_{\text{ML}}^{-1}$  étaient utilisées.

Sur la figure 5.11, une corrélation forte entre l'enrichissement nécessaire et la proportion d'éléments fissiles au sein du vecteur plutonium est observée. Cette corrélation n'est pas linéaire, car l'augmentation de la proportion du plutonium engendre une augmentation de l'absorption des neutrons thermiques et donc un durcissement du flux comme analysé par [17] et [18].

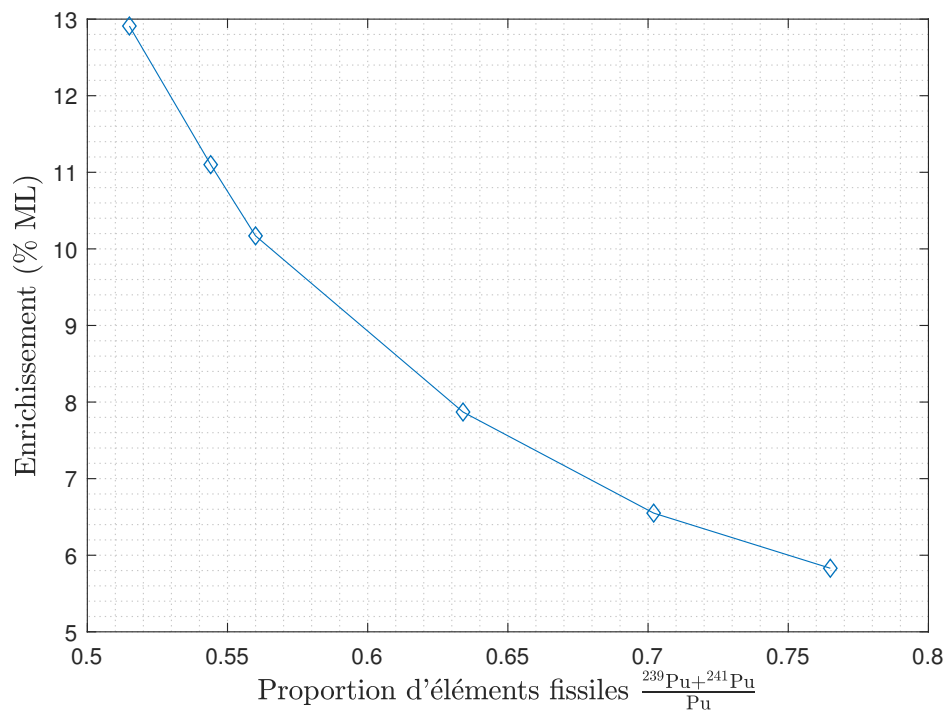


Figure 5.11 Corrélation entre pourcentage d'enrichissement (% ML) et proportion d'éléments fissiles parmi le vecteur plutonium.

Un travail important a été mené de manière dichotomique afin de déterminer 21 niveaux de combustion différents pour le combustible UOx et pour les combustibles MOx correspondants aux 21 niveaux de combustions distincts amenés à apparaître au cours de l'évolution du cœur. Pour les combustibles MOx, un comportement physique non uniforme, mais qui peut être corrigé linéairement en fonction de la proportion d'éléments fissiles parmi le vecteur isotopique total est observé. Cette procédure permet d'éviter de définir des valeurs pour chacune des

compositions de MOx (ce qui est de toute façon inenvisageable, car cette composition est par essence inconnue). La correction linéaire est centrée sur le cas de référence MOX2. La connaissance de la seule proportion d'éléments fissiles par rapport au vecteur plutonium total permet ensuite d'obtenir de très bons résultats et ce quelle que soit la répartition entre les différents isotopes du plutonium et de l'américium 241 dans le combustible envisagé. Le facteur correctif pour la qualité des combustibles MOx est calculé selon :

$$Corr_{MOx} = \frac{\%_{Fissile} - \%_{Ref}}{\Delta\%} \quad (5.2)$$

où  $\%_{Ref}$  est pris égal à 63 % ce qui correspond au combustible MOX2 et  $\Delta\% = 12.5$ . Ainsi le pire combustible MOX3 (pour lequel  $\%_{Fissile} = 51.5\%$ ) se verra attribuer un facteur correctif de -0.92 et le meilleur combustible MOX1 (pour lequel  $\%_{Fissile} = 70.25\%$ ) se verra attribuer un facteur correctif de +0.58. Ce facteur est ensuite utilisé de manière à corriger la valeur initialement attribuée au burnup de la zone de combustion  $i$  considérée selon :

$$BU_{iCorr} = BU_{iref} \pm Corr_{MOx} \times \Delta BU_i \quad (5.3)$$

où  $\Delta BU_i$  est caractéristique de la zone de combustion  $i$  et a été déterminé empiriquement tout comme le sens de la correction (positif pour une augmentation du burnup de la zone de combustion considérée avec un facteur de correction positif, etc.). Les valeurs prises par  $\Delta BU_i$  sont comprises dans la gamme  $[0 ; 3.25]$  (GWj.t<sub>ML</sub><sup>-1</sup>) ce qui n'est pas négligeable. Enfin une dernière correction correspondant à la longueur du cycle a été introduite. Cela permet d'utiliser le schéma de calcul présenté pour une gamme de longueurs de cycle allant de 320 à 390 jours quel que soit le type de combustible UOx ou MOx. Le facteur de correction correspondant à la variation du temps de cycle prend la forme suivante :

$$Corr_T = \frac{T_{cycle}}{T_{ref}} \quad (5.4)$$

où  $T_{ref}$  est le temps de cycle de référence sur lequel les valeurs de  $BU_i$  ont été ajustées et correspond à 350 jours. Il suffit par la suite d'appliquer ce facteur aux valeurs de burnup de la zone de combustion  $i$  considérée (déjà corrigées pour le MOx le cas échéant) selon :

$$BU_i = BU_{icorr} \times Corr_T \quad (5.5)$$

L'ensemble de ces considérations a conduit à établir les prédictions de burnups de chargement détaillées dans les figures 5.12 et 5.13. Dans ces figures, un phénomène de non-symétrie tout à fait naturel est observé. En effet, à la fin du deuxième cycle les assemblages présentant une

symétrie par huitième de cœur sont au nombre de  $4 \times 4 = 16$  tandis que dans le troisième cycle ils sont seulement  $2 \times 4 = 8$  à présenter cette caractéristique. Les autres assemblages présentant des symétries par quart de cœur. Cela implique que lors de la permutation entre ces deux cycles une inévitable dissymétrie va être créée. Le cœur ne sera alors plus symétrique que par moitié au mieux. C'est pourquoi les assemblages F06 et J10 ou J06 et F10 par exemple peuvent différer légèrement. Ceci entraîne bien évidemment des perturbations dans leur voisinage immédiat. Néanmoins, les écarts initiaux étant faibles, les perturbations secondaires le sont d'autant plus.

Après avoir établi ces relations, il est nécessaire d'évaluer leur fiabilité. Pour cela, le critère choisi a été de comparer les burnups réellement obtenus au moment du quatrième déchargement (correspondant à l'instant pour lequel le combustible neuf au cycle 0 est déchargé) et les burnups à la fin du premier cycle (normalement strictement identiques en régime stationnaire). La figure 5.12 présente les distributions de burnup initiales obtenues via notre méthode de prédiction pour le combustible UOx de référence dans le cas de quatre cycles de 350 jours (correspondant à un enrichissement de 4.10 %), les distributions de burnup finales après un cycle, les distributions de burnup finales après quatre cycles et les écarts entre les burnups de rechargement effectifs au quatrième cycle et ceux prédits au premier cycle. Les figures 5.13, 5.14 et 5.15 présentent les mêmes résultats pour les six combustibles MOx de référence.

Sur la figure 5.12 des écarts entre les burnups prédits et effectivement mesurés inférieurs à  $0.4 \text{ GWj.t}_{\text{ML}}^{-1}$  sont constatés pour l'UOx. Sur la figure 5.15 des écarts inférieurs à  $0.15 \text{ GWj.t}_{\text{ML}}^{-1}$  sont notés pour le cas MOX2. Pour les MOx, les corrections en fonction du temps de cycle et de la proportion d'éléments fissiles sont appliquées et c'est le combustible MOX2 qui sert de référence. Dans le cas UOx seule la correction en fonction du temps de cycle est effectuée.

Quel que soit le combustible MOx considéré, des écarts maximums par assemblages inférieurs à  $1.3 \text{ GWj.t}_{\text{ML}}^{-1}$  (avec des moyennes pour les cœurs nettement en dessous de ces valeurs) sont relevés. Il est particulièrement intéressant de constater des écarts si faibles alors que seule la proportion d'éléments fissiles dans le vecteur plutonium total est considérée. La proportion de certains des isotopes au sein du vecteur plutonium a tout de même une importance visible. En effet, les écarts moyens et les assemblages présentant les déviations les plus importantes ne sont pas du tout les mêmes entre des cœurs chargés en combustible MOX1 et en combustible MOX3 par exemple. Ceci est probablement dû à des effets fins liés aux plutoniums 239, 240 et 241. Comme cela a été évoqué dans la partie 4.6, ces isotopes sont à l'origine de dépressions importantes dans le flux neutronique liées à des absorptions très spécifiques. Les autres plutoniums ont également des absorptions importantes mais leur faible proportion rend

l'effet global sur le flux invisible. La proportion relative des plutoniums 239, 240 et 241 influe sur l'importance relative de ces dépressions. Le spectre local du flux est également fonction de la proximité du modérateur, des éléments réflecteurs et de la nature des assemblages environnants. La combinaison de ces facteurs explique pourquoi certains assemblages dévient plus fortement par rapport aux prédictions. Cela explique également pourquoi ce ne sont pas toujours les mêmes assemblages qui présentent les écarts les plus importants. C'est pourquoi le cas MOX3 pour lequel la proportion de plutonium 240 et celle de plutonium 241 sont respectivement 50% supérieure et 50 % inférieure au cas MOX2 (de référence) présente des écarts relativement importants par rapport à la prédiction. Pour le cas MOX1 ayant une composition différant de moins de 20 % (pour chacun des isotopes) avec la référence, les écarts sont à la fois plus faibles et différemment répartis.

Ainsi, les écarts sur les burnups de déchargement mesurés sont très faibles et valident donc notre méthode de prédiction en dépit de son apparente simplicité. Dans le cas des combustibles MOx des développements supplémentaires auraient pu être envisagés afin d'introduire des corrections suivant la proportion des isotopes 239, 240 et 241, mais n'ont pas été considérées comme nécessaires étant donné qu'avec les corrections adoptées les écarts maximums sur les burnups des assemblages sont inférieurs à 2 %.



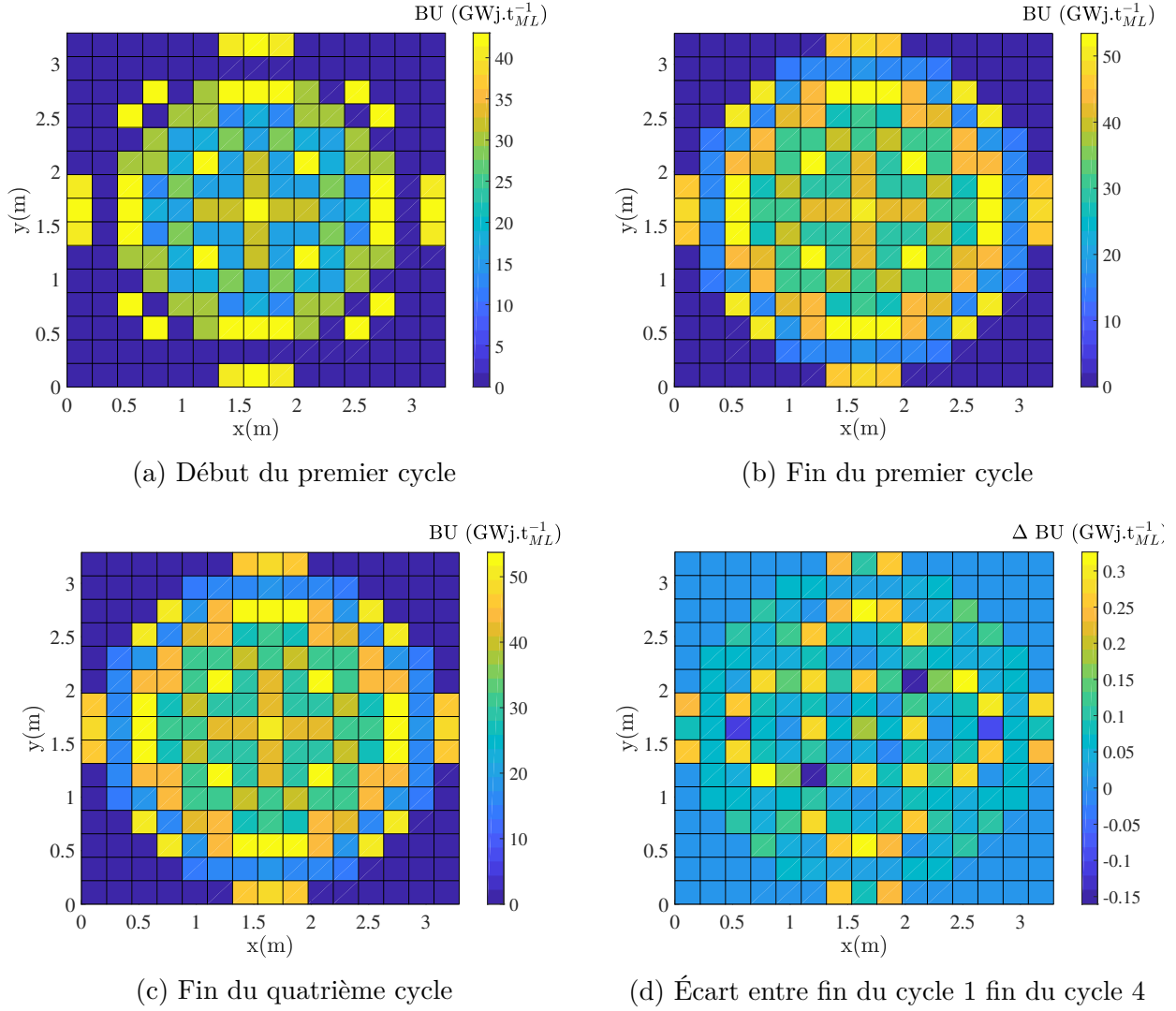


Figure 5.12 Burnups initiaux, après un cycle, après quatre cycles et écarts entre la fin du premier cycle et la fin du quatrième cycle pour un cœur UOx et cycle de 350 jours.

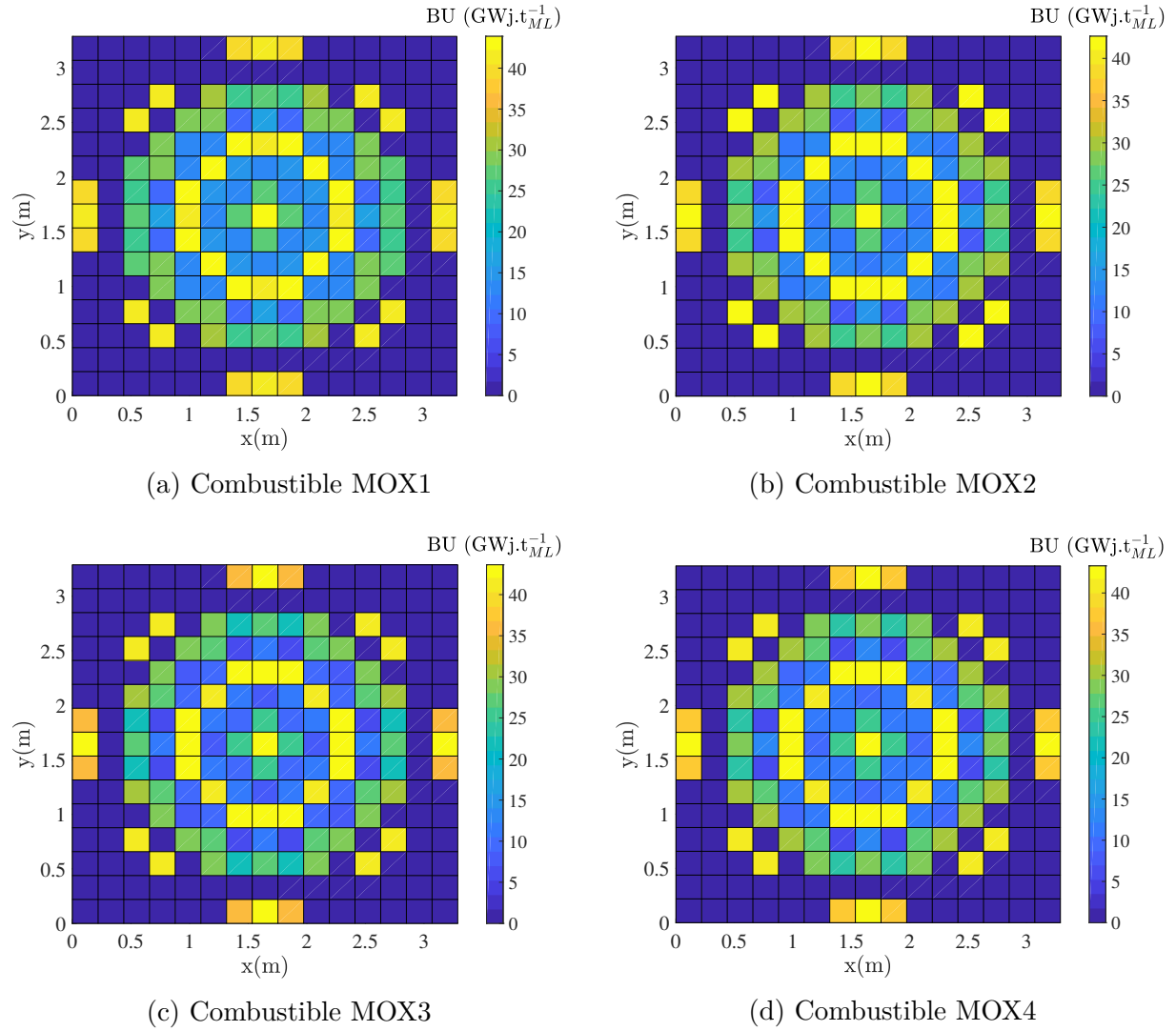


Figure 5.13 Burnups initiaux déterminés empiriquement et corrigés selon la qualité du combustible MOx pour des cycles de 350 jours.

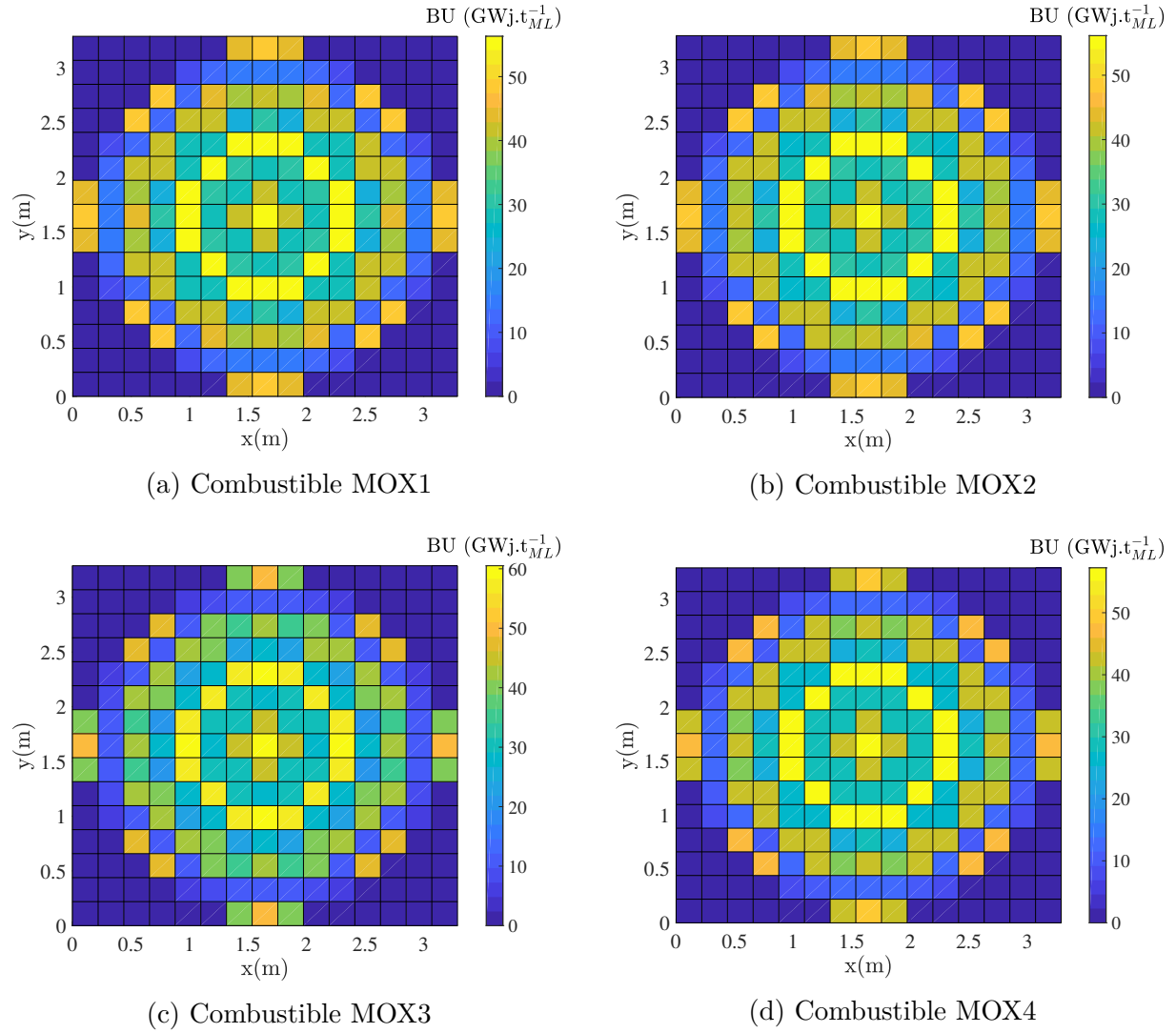


Figure 5.14 Burnups finaux après quatre cycles de 350 jours pour les différents combustibles MOX.

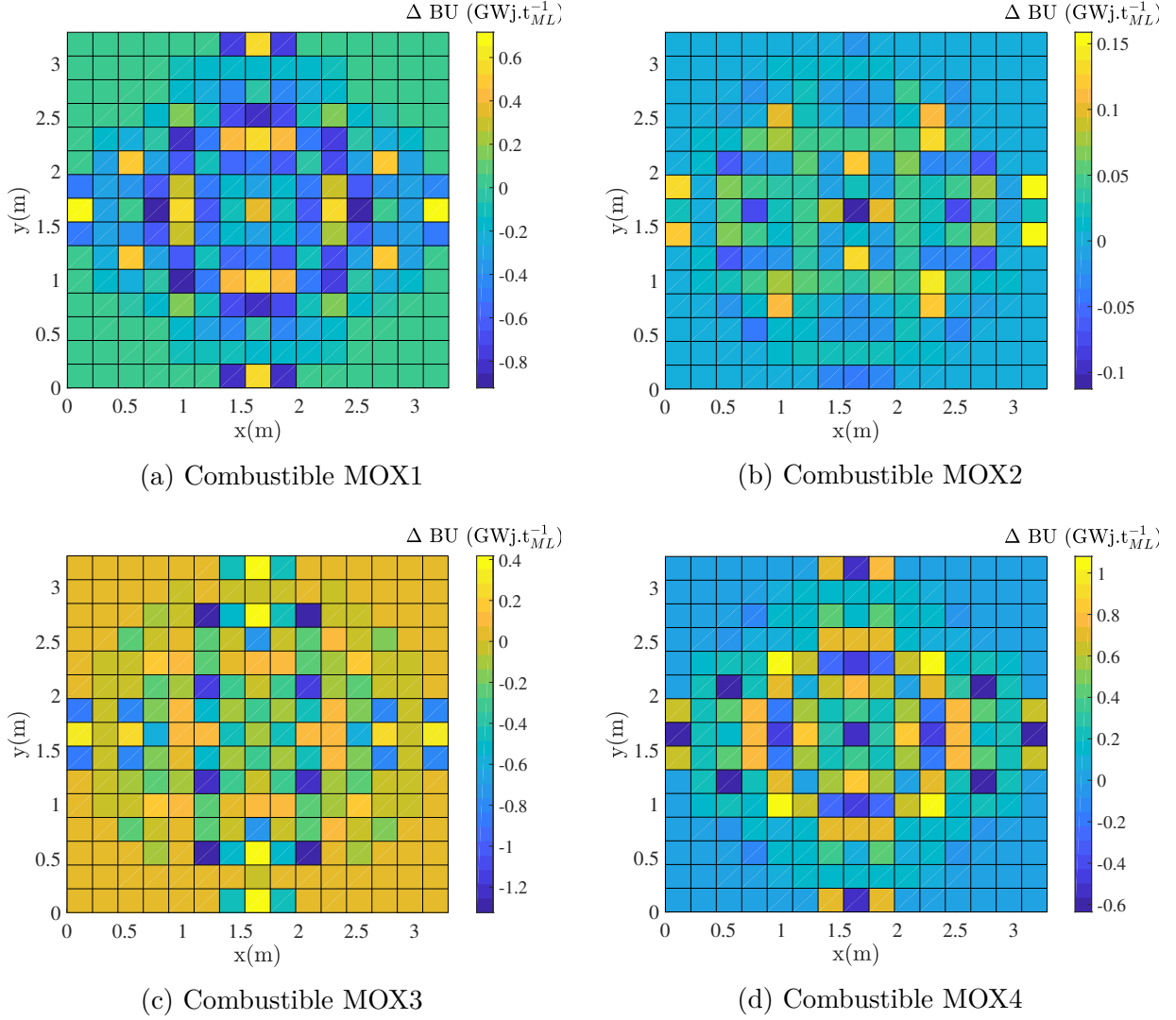


Figure 5.15 Écarts entre les burnup obtenus après 350 et  $4 \times 350$  jours pour les combustibles MOX.

## 5.7 Calcul automatique de l'enrichissement

Cette section détaille le calcul automatique de l'enrichissement du combustible implémenté dans les calculs de cœur de ce projet. Les conditions permettant de déterminer l'enrichissement sont les suivantes :

- On cherche un pourcentage d'enrichissement minimal afin de minimiser la consommation de ressource.
- On veut que le réacteur soit critique avec une concentration de bore nulle au moment du rechargement.

— Dans le cas d’un combustible MOx le vecteur isotopique est inconnu à priori.

Concrètement, lors du calcul de cœur, le module `FINDO` de GANLIB [34] (également disponible dans DONJON5) est utilisé itérativement afin de déterminer le pourcentage d’enrichissement en matériaux fissiles satisfaisant la condition de criticité au moment du rechargement. Les valeurs d’enrichissement calculées automatiquement via cette procédure pour les combustibles de référence et dans le cadre d’une simulation avec des cycles de 340 et 370 jours (équivalents pleine puissance), sont résumées dans le tableau 5.7.

Tableau 5.7 Enrichissements (%  $^{235}\text{U}$  (UOx) ou % Pu (MOx)) calculés pour un réacteur chargé entièrement avec chacun des combustibles de référence dans le cas d’un cycle 340 ou 370 jours.

	Temps de cycle (JEPP)	
Combustible	340	370
UOx	3.78	4.10
MOX1	5.99	6.55
MOX2	7.21	7.87
MOX3	12.11	12.91
MOX4	10.25	11.10

## 5.8 Calcul automatique de la concentration de bore critique

Cette section détaille la construction d’un algorithme permettant de déterminer automatiquement la concentration en bore liquide à chaque pas d’évolution. Le bore est un noyau présentant une section efficace de capture importante dans le domaine thermique (de l’ordre de  $10^4$  barns) et constitue le principal moyen de pilotage des REP. En opération, la concentration de bore est ajustée (en parallèle avec d’autres moyens de pilotage tels que les barres de commande) afin de maintenir un cœur critique à chaque instant. Le fait d’ajouter du bore modifie le flux neutronique et influe donc l’évolution du combustible. C’est pourquoi il est intéressant de simuler un cœur critique à chaque instant. Enfin, l’hypothèse de stationnarité (i.e.  $k_{\text{eff}}=1$ ) est nécessaire afin d’utiliser les développements théoriques effectués dans la section 3.5.

Néanmoins, il s’agit d’un effet fin, il n’est donc pas nécessaire de l’implémenter lors du calcul de l’enrichissement. Autrement dit, le problème est simplifié en effectuant un calcul d’enrichissement à concentration de bore nulle puis un calcul de bore critique à chaque pas. En l’absence de bore la réactivité des cœurs de référence étudiés présente les variations repré-

sentées sur les figures 5.16 et 5.17 dans le cas d'un temps de cycle de 350 jours (équivalents pleine puissance).

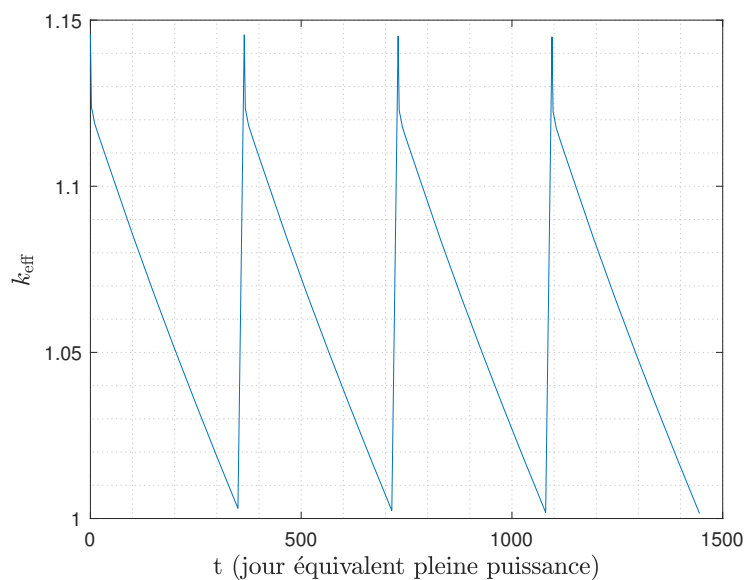


Figure 5.16  $k_{\text{eff}}$  en fonction du temps pour un réacteur chargé entièrement avec du combustible UOx (cycle de 350 jours) en l'absence de bore dans le modérateur.

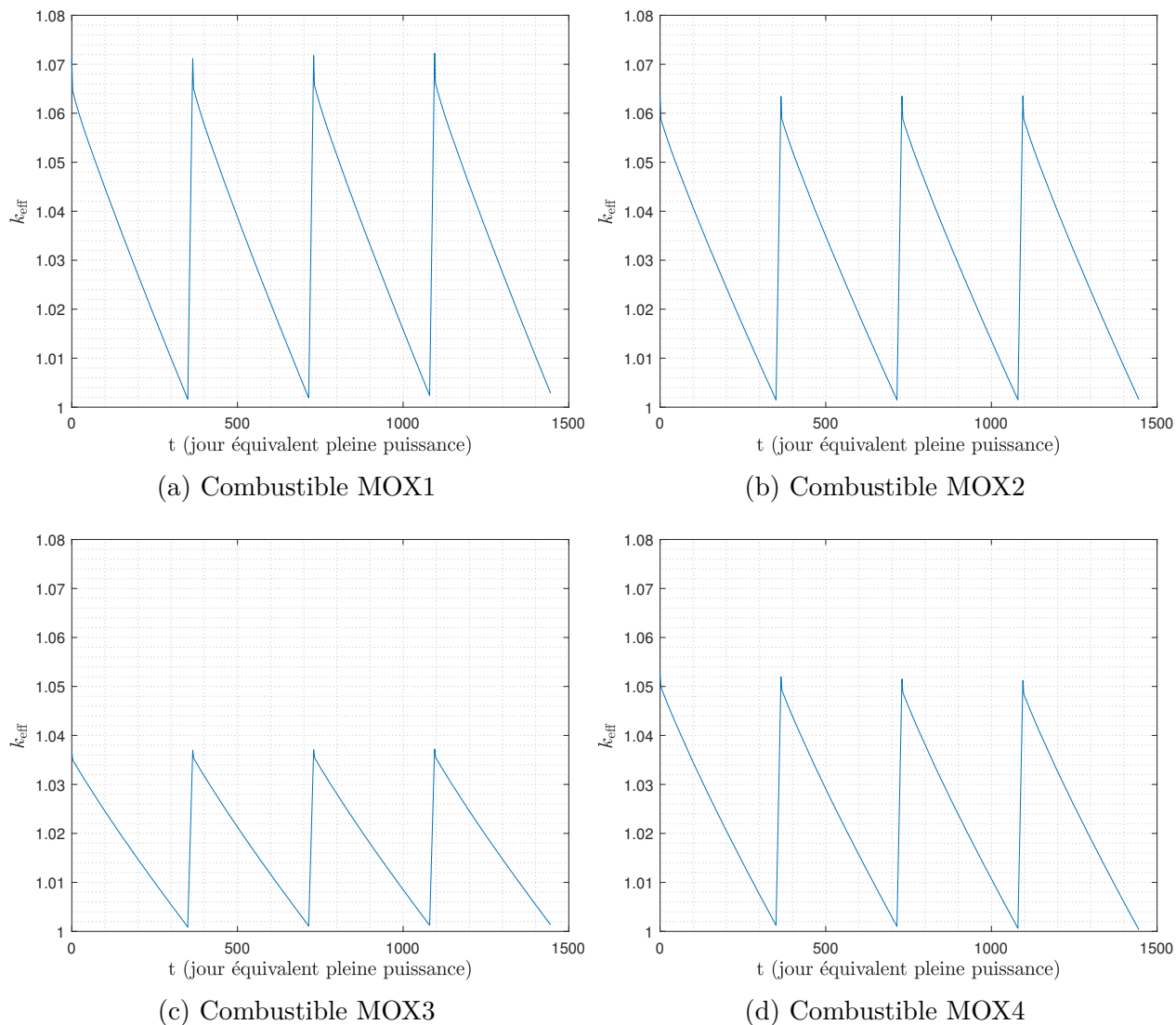


Figure 5.17  $k_{\text{eff}}$  en fonction du temps pour des réacteurs chargés entièrement avec les combustibles MOx de référence (cycles de 350 jours) en l'absence de bore dans le modérateur.

La mise en oeuvre concrète consiste, ici encore, à appeler itérativement le module **FINDO**: de **DONJON5**, à chaque pas de temps et non seulement au moment du rechargement. Les valeurs de concentrations de bore (ppm) calculées automatiquement via ce procédé pour des cœurs chargés uniformément avec les combustibles de références sont résumées dans le tableau 5.7.

Tableau 5.8 Concentrations de bore critique (ppm) calculées immédiatement après recharge-  
ment pour un réacteur chargé entièrement avec chacun des combustibles de référence dans le  
cas d'un cycle de 320 ou 350 jours.

Combustible	Temps de cycle (JEPP)	
	320	350
UO <sub>x</sub>	1514	1690
MOX1	1708	1861
MOX2	1679	1836
MOX3	1258	1389
MOX4	1689	1868

Ces valeurs sont inférieures au seuil de 2500 ppm qui ne peut être dépassé en raison de problèmes de recristallisation de l'acide borique dans les circuits annexes d'après [35]. L'ensemble des combustibles considérés permet de se maintenir nettement en dessous de cette limite.

La lecture de ces résultats permet d'envisager une approche simplifiée du calcul de bore critique. En effet, après une chute initiale due à la disparition du xénon 135 (et dans une moindre mesure du samarium 149) le profil des variations de la concentration de bore avec le temps (ou l'irradiation) est essentiellement linéaire. Ainsi, la concentration de bore critique peut être calculée jusqu'à ce que les équilibres xénon et samarium soient établis puis la tendance jusqu'au rechargement être prolongée linéairement. L'approche est en fait doublement simplifiée. Le premier niveau de simplification, fondé sur le constat précédent, consiste à effectuer une interpolation linéaire des valeurs de bore critique après 20 jours de fonctionnement et ce jusqu'au rechargement. Le deuxième niveau de simplification consiste, lui, à réemployer les valeurs déterminées au premier cycle pour les cycles 2, 3 et 4.

Pour ce faire, les valeurs de bore critique à chaque pas de temps sont calculées pour le premier cycle et celles à l'instant initial, après 2.5, 5, 10 et 20 jours sont sauvegardées. Pour les cycles 2 à 4 ces valeurs sont réemployées et une interpolation entre la valeur à 20 jours et au rechargement (à bore nul) est effectuée pour les autres itérations. Le résultat de ce calcul approché est présenté sur les figures 5.18 et 5.19. Cette procédure permet une très bonne approximation du calcul effectué à chaque pas via une démarche extrêmement simple et ce quelle que soit le combustible étudié. De plus, cette approximation permet de réduire les temps de calcul d'environ 70 %. Les déviations associées à cette approximation sur les inventaires sont limitées à moins de 0.1 % (relatifs) ce qui est assez exceptionnel puisque cette erreur inclut d'une part l'interpolation linéaire pour les pas de temps compris entre 20 jours et la fin de cycle et également le fait de reproduire les valeurs obtenues pour le premier



aux autres cycles.

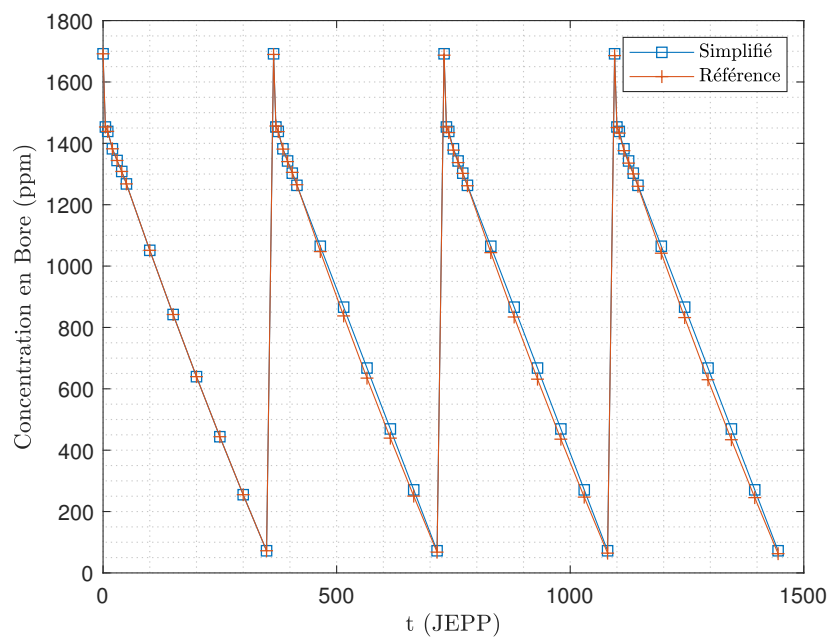


Figure 5.18 Concentration de bore en fonction du temps (jours équivalents pleine puissance) pour un réacteur UOx et quatre cycles de 350 jours.

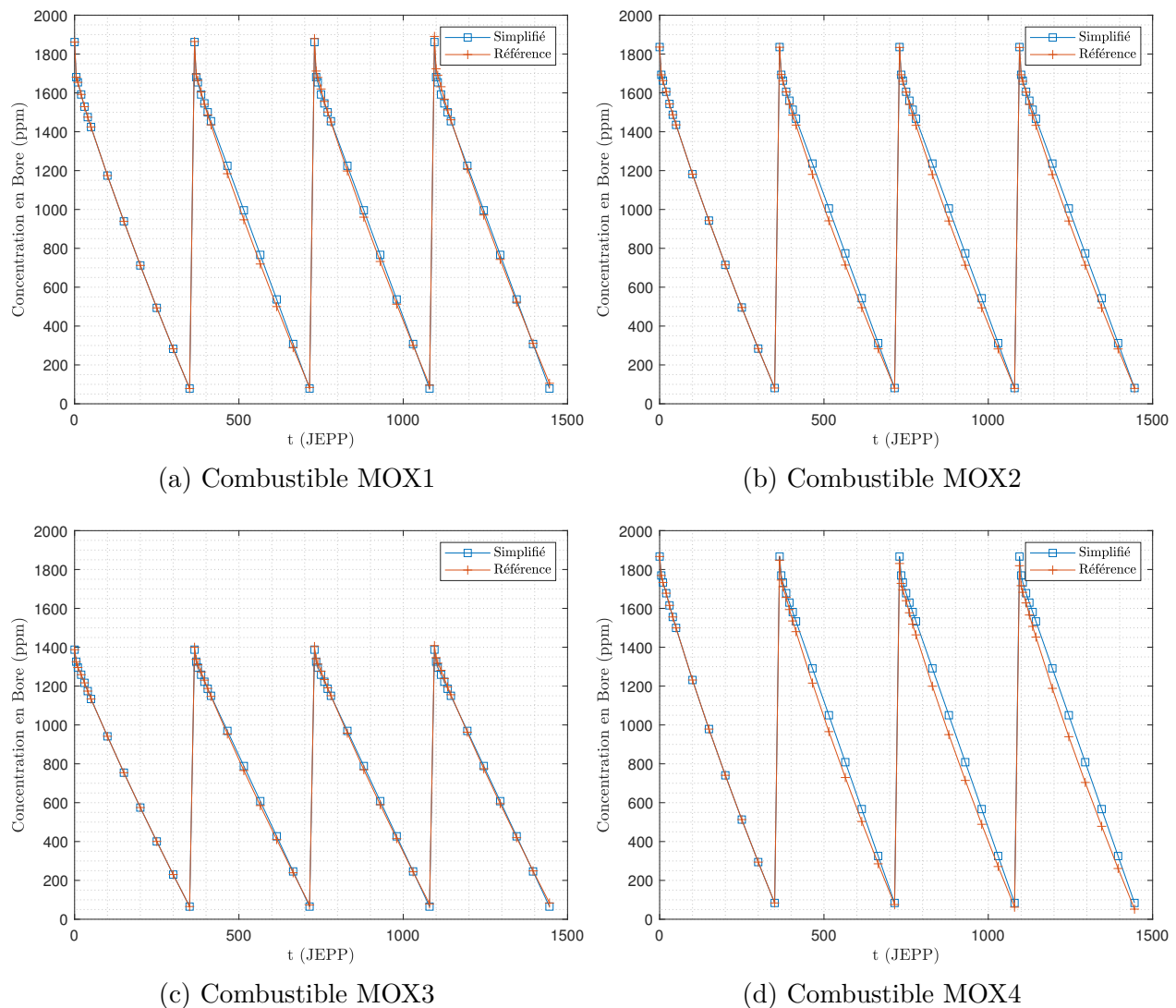


Figure 5.19 Concentrations de bore critique pour des réacteurs chargés uniformément avec les combustibles MOx de référence pour quatre cycles de 350 jours.

### 5.8.1 Efficacité du bore

Dans toute notre étude, l'ajout de bore liquide comme poison neutronique est le seul moyen de piloter la criticité du réacteur qui est simulé. D'autres moyens tels que les barres de contrôle permettent un apport de réactivité négative en cœur mais ne sont pas, ici, simulés.

Plusieurs observations peuvent être effectuées concernant l'ajout de bore dans le réacteur. Dans le cas des réacteurs UOx ou 100 % MOx de ce travail, l'efficacité du bore est comparable à celle mesurée dans les travaux de [33]. Pour le cœur UOx une efficacité de 10 pcm par ppm en début de cycle et 8.5 pcm par ppm en fin de cycle est mesurée. La diminution de cette

efficacité avec l'irradiation s'explique par le durcissement du flux lié à l'augmentation du contenu en plutonium dans le combustible comme cela est visible sur la figure 4.12. Notons, que dans les travaux de [33] l'efficacité du bore augmente avec l'irradiation ce qui semble assez étrange puisque le flux se durcit. Peut-être que la sur-modération considérée dans notre étude peut expliquer cela.

Pour les cœurs MOx, l'efficacité du bore est fonction de la proportion d'isotopes fissiles et de l'enrichissement comme cela est visible sur les graphiques de la figure 5.20. De la même manière que l'apparition du plutonium dans le combustible UOx provoque un durcissement du flux, un durcissement avec la proportion de plutonium par rapport au total des éléments lourds (et une perte d'efficacité du bore qui en est la conséquence) est noté. Par contre, dans le MOx l'effet de l'irradiation est inverse au phénomène observé dans l'UOx, la proportion de flux thermique tend à augmenter avec l'irradiation (par disparition du plutonium 239 et de son importante absorption thermique) ce qui est visible sur la figure 4.12, par exemple, et conduit à légèrement améliorer l'efficacité du bore avec l'irradiation (pour des proportions d'éléments fissiles parmi le vecteur plutonium total supérieures à 60 %). Ces constats sont à nuancer dans le cas des combustibles MOx très enrichis (i.e. dont la proportion d'éléments fissiles est faible, inférieure à 60%) car ils comportent tellement de poisons neutroniques (plutonium 240 et 242 notamment) que l'effet du plutonium 239 n'est plus nécessairement majoritaire.

Dans le cas d'un combustible MOx comportant environ 75 % d'éléments fissiles l'efficacité du bore augmente avec l'irradiation et vaut environ 4.1 pcm par ppm en début de cycle et 4.3 pcm par ppm en fin de cycle ce qui est comparable avec les valeurs obtenues pour l'assemblage  $17 \times 17$  sur-modéré étudié par [33] (les autres qualités de MOx ici traitées ne l'ont pas été dans ces travaux). Bien que le seuil des 4 pcm par ppm d'efficacité de bore (pour des proportions d'éléments fissiles inférieures à 70%) requis pour la sûreté du réacteur d'après [35] soit franchi, il est aisé de revenir à des niveaux supérieurs à cette limite en enrichissant le bore employé. En effet, le bore naturel comporte environ 19.9 % de bore 10 et 80.1 % de bore 11 et seul le premier présente une section efficace d'absorption importante dans le domaine thermique. Un enrichissement minimal en bore 10 peut permettre de revenir au-dessus du seuil comme démontré dans les travaux de [33].

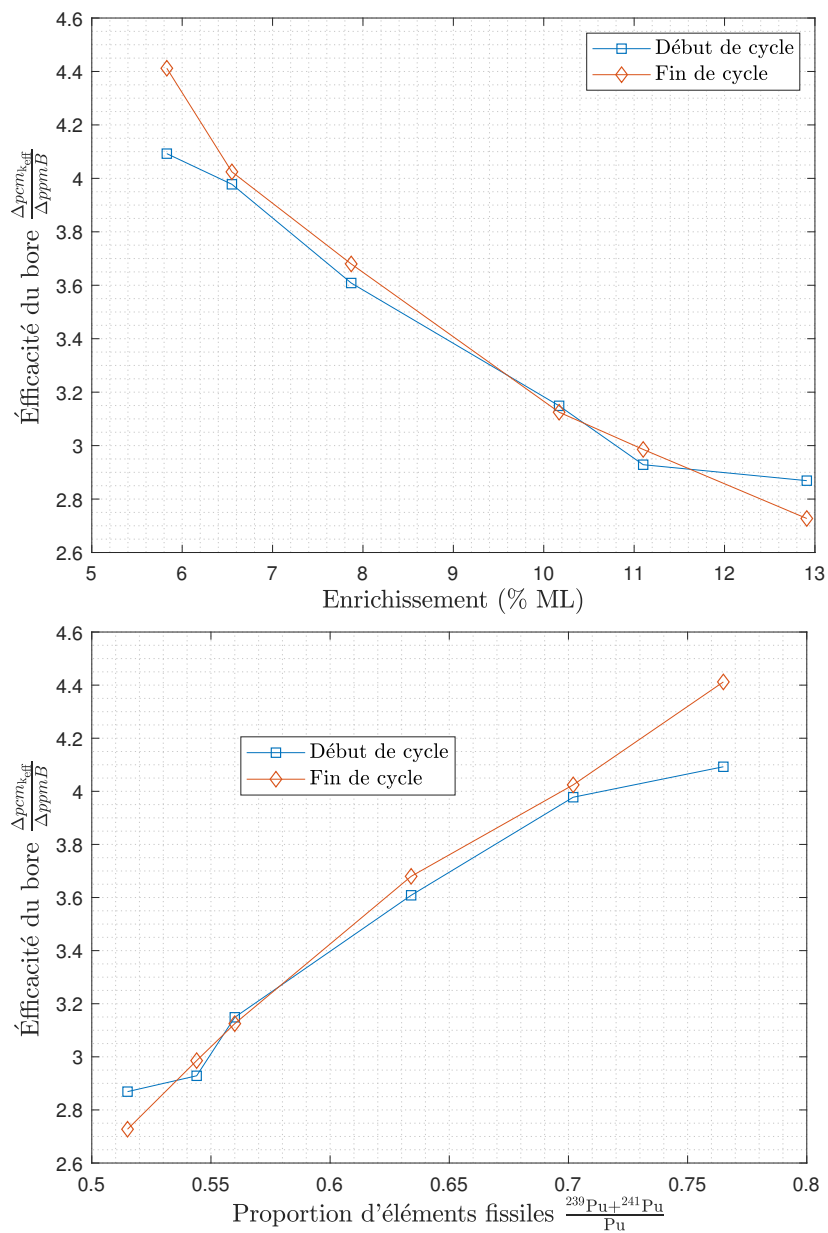


Figure 5.20 Éfficacité du bore en fonction de l'enrichissement du combustible et de la proportion d'éléments fissiles dans le vecteur plutonium en début et fin de cycle.

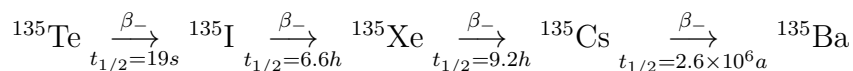
## 5.9 Impact des isotopes xénon 135, samarium 149 et plutonium 241 sur la simulation

### 5.9.1 Effet Xénon

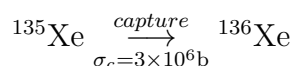
L'effet Xénon est crucial dans l'opération des réacteurs à eau pressurisée. En REP, le tellure 135 est produit à raison d'environ 6 % des produits de fission. C'est la source majoritaire

d'iode 135 et par parenté du xénon 135 qui est également produit directement, mais dans une ampleur très inférieure (de l'ordre de 0.2 % des PF). En fonctionnement à puissance nominale, le xénon est à l'équilibre car il est généré à taux constant par l'iode 135 (après établissement de son propre équilibre de l'ordre de la journée) lui-même généré par le tellure 135 produit à taux constant par les fissions (après établissement de son propre équilibre de l'ordre de la minute). Il est ensuite soit consommé par réaction de capture neutronique (en présence de flux important), sa section efficace de capture thermique étant la plus grande connue (de l'ordre de  $3 \times 10^6$  barns), soit par désintégration naturelle.

La chaîne de production et désintégration naturelle du xénon 135 est la suivante :



La réaction de capture neutronique sur le xénon 135 est la suivante :



Lors d'un arrêt du réacteur, le flux neutronique devient nul et la réaction de capture (qui consommait quasiment tout le xénon 135 produit) disparaît, tout comme son précurseur. Cela pose des problèmes en cas d'arrêt et redémarrage brusque, car le xénon voit temporairement sa concentration augmenter fortement (sur une échelle de un à deux jours) mais n'est pas préoccupant dans ce projet car les arrêts correspondants aux rechargements sont des arrêts de l'ordre de 30 jours. Après ce délai, la totalité des précurseurs et du xénon 135 temporairement formé ont disparu. Le phénomène de pic xénon se manifeste lui sur une échelle de un à deux jours.

La question est : faut-il se préoccuper de la disparition du xénon 135 dans les assemblages anciens au moment du rechargement ? Les assemblages ayant déjà effectués un, deux et trois cycles, sont déplacés dans le cœur et, puisque l'interpolation des bases de données réseau ne se fait qu'en fonction de leur degré d'irradiation et des pourcentages massiques en isotopes du plutonium, des perturbations en bore et de l'enrichissement, la disparition du xénon 135 n'est pas prise en compte. Il est inenvisageable de simuler un pas à flux nul permettant une "remise à zéro" du xénon 135 sans effectuer un calcul de microévolution pour cet isotope à chaque pas (ce qui coûterait extrêmement cher). La modélisation adoptée consiste à considérer qu'à l'instant suivant le rechargement, les assemblages anciens ont déjà leur concentration de xénon d'équilibre et seuls les assemblages neufs (40 sur 157) ont initialement une concentration nulle en xénon. Autrement dit notre cœur ne devrait présenter qu'une fraction égale à  $\frac{40}{157}$  de la surréactivité initiale due à la disparition du xénon pendant le rechargement.

Remarquons que :

— Comme l'équilibre du xénon s'établit en moins d'une journée les effets de retour à

l'équilibre concerneront donc une durée d'irradiation de  $\frac{1}{350} \leq 0.3\%$  du temps de cycle total. Ce qui ne pourra induire que des effets d'un ordre de grandeur encore inférieur sur les inventaires.

- L'effet du xénon 135 est très ponctuel (échelle de quelques heures) et sera compensé partiellement par des barres de contrôle et non uniquement par du bore soluble. Comme les barres de contrôle ne sont pas simulées dans le cadre de notre projet il semble difficile de prendre en compte cette surréactivité initiale sans envisager des concentrations de bore extrêmement fortes.
- L'effet Xénon à l'équilibre étant négatif de l'ordre de 4500 pcm (pour un REP complet) il est attendu une surréactivité positive de l'ordre de 4500 pcm au démarrage.

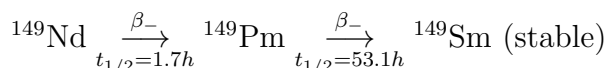
La surréactivité simulée est de l'ordre de 2000 pcm pour un cœur UOx et 500 pcm pour un cœur 100% MOx. Dans le cas UOx, cela semble en contradiction avec le fait que l'on attend un quart seulement de la surréactivité initiale (environ 1100 pcm) qui serait observée en cas de remise à zéro du xénon pour le cœur complet. Il faut également noter que ces surréactivités incluent les effets liés au samarium et qui sont discutés dans la section suivante.

Néanmoins, une explication simple peut être donnée. Les assemblages neufs sont disposés de manière circulaire en périphérie du cœur comme cela est visible sur la figure 5.4. Or, dans le cas d'un cœur UOx le flux dans les premiers instants est concentré en périphérie, comme cela est visible sur la figure 5.6a, avec des valeurs pour ces assemblages de l'ordre de deux fois la valeur nominale. L'effet lié au xénon effectivement observé est proportionnel au flux thermique dans ces assemblages et apparaît donc comme deux fois plus important qu'attendu. Dans le cas des réacteurs avec combustible MOx, deux effets expliquent une surréactivité initiale mesurée beaucoup plus faible qu'attendu. D'une part, le flux est durci, la proportion de flux thermique étant plus faible, l'effet du Xénon 135 s'atténue. Un second effet, visible sur la figure 5.10a, est que le flux n'est pas concentré en périphérie comme dans le cas UOx ainsi il n'y a pas de doublement de l'effet xénon apparent et la perte de réactivité initiale due à l'empoisonnement est beaucoup plus faible.

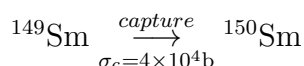
En conclusion, l'hypothèse consistant à négliger  $\frac{3}{4}$  de l'effet xénon est valable pour le combustible UOx car elle n'affecte que pendant quelques jours les conditions d'irradiation du combustible et l'effet est tout de même partiellement pris en compte (environ pour moitié). Pour le combustible MOx, elle est d'autant plus légitime, que l'effet du xénon est considérablement plus faible en raison du durcissement du spectre.

### 5.9.2 Effet Samarium

Le raisonnement pour le samarium 149 est très différent de celui adopté pour le xénon 135, d'une part le temps d'établissement de l'équilibre du samarium est beaucoup plus long (de l'ordre de plusieurs jours), d'autre part sa section de capture est plus faible et sa concentration à l'équilibre plus importante. Il est en effet généré par environ 1% des fissions, mais sa section efficace étant plus faible il n'est pas consommé aussi rapidement que le xénon. Enfin, le samarium ne disparaît pas en l'absence de flux neutronique, car c'est un isotope stable. La chaîne de production du samarium 149 est la suivante :



La réaction de capture neutronique sur le samarium 149 est la suivante :



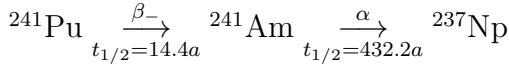
Du point de vue de notre étude le cas du samarium 149 est moins problématique que celui du xénon 135. En effet, isotope stable en l'absence de flux neutronique le samarium verra sa concentration augmenter légèrement dans les assemblages déplacés lors du rechargement dû à la transformation du stock de prométhium 149 en samarium 149. Cette augmentation de concentration génère des effets de réactivité négatifs de l'ordre de 500 pcm pour un coeur complet soit environ 370 pcm pour  $\frac{117}{157}$  de coeur. Il n'apparaît donc pas nécessaire d'envisager de prendre en compte le pas à flux nul pour cet isotope. Pour les assemblages neufs, le régime d'établissement du samarium est pris en compte dans la section efficace macroscopique totale en fonction de l'irradiation. Dans le cas du Samarium le même effet de doublement comparé à la contribution attendue en raison de la distribution de flux initiale pour le coeur UOx est observé. De plus, l'effet est plus faible dans le cas d'un coeur MOx en raison du durcissement du flux (puisque la section efficace du samarium 149, comme celle du xénon 135 est importante en domaine thermique seulement). Notre manière de simuler le rechargement ne comporte donc qu'une simplification très faible concernant l'effet samarium qui au passage compense partiellement la non prise en compte de la disparition du xénon dans les assemblages anciens.

### 5.9.3 Effet des désintégrations du plutonium 241 durant le rechargement

Le plutonium 241 est le seul parmi les isotopes d'intérêt, présent en quantité (de 5 à 20 % du plutonium total) qui ait une durée de vie courte ( $t_{1/2} = 14.4a$ ). D'autres isotopes comme les curium 243 et 244 se désintègrent en générant des isotopes d'intérêt (respectivement plutonium 239 et 240) et ont des durées de vie similaires mais sont présents en quantités considérablement plus faibles (un facteur de moins de  $\frac{1}{100}$ ). De plus, par désintégration naturelle le plutonium 241 conduit à l'américium 241 qui est un poison neutronique majeur

et qui, sans être stable se désintègre très lentement ( $t_{1/2} = 432.2a$ ). Comme notre étude consiste à simuler précisément les inventaires (dont ceux en plutonium 241 et américium 241) et les besoins en enrichissement de réacteurs, il a fallu absolument prendre en compte cette décroissance naturelle du plutonium 241 pendant le délai de trente jours correspondant au rechargement.

La chaîne de désintégration du plutonium 241 et de l'américium 241 est la suivante :



Notons que la durée de rechargement de trente jours n'implique pas une déviation majeure sur la quantité de plutonium 241 puisque :

$$^{241}\text{Pu}(t = t_0 + \Delta t) = ^{241}\text{Pu}(t = t_0) \exp\left(\frac{-\Delta t}{\tau}\right) = ^{241}\text{Pu}(t = t_0) \times 0.996 \quad (5.6)$$

avec  $\tau = \frac{t_{1/2}}{\ln 2}$  et  $\Delta t = 30$  jours.

En revanche, la totalité des atomes de plutonium 241 vont former des atomes d'américium 241 ce qui correspondra à une augmentation d'environ  $0.04 \times \%^{241}\text{Pu} = 0.2$  à  $0.8\%$  du vecteur plutonium total. Or les quantités d'américium 241 sont de l'ordre de quelques % ce qui représente donc une augmentation considérable. Néanmoins, l'effet sur la réactivité de l'augmentation de la concentration en américium 241 et de la diminution en plutonium 241 est bien inférieur aux deux effets précédemment évoqués. De plus, il n'y a pas d'effet transitoire pour ces isotopes par conséquent l'erreur générée est négligeable devant les approximations faites sur la durée entre la fabrication (retrait de l'américium 241) et l'utilisation du combustible à priori bien plus importante que 30 jours. Enfin, la quasi-totalité de ces effets peut être pris en compte en modifiant légèrement les inventaires en plutonium 241 et américium 241 avant entrée en réacteur (en considérant la décroissance naturelle de  $2 \times 30 = 60$  jours) et après sortie du réacteur (en considérant la décroissance naturelle de  $2 \times 30 = 60$  jours également). Puisque les variations de réactivité considérées sont extrêmement faibles, les effets secondaires sur les autres isotopes ou sur le spectre seront eux complètement négligeables.



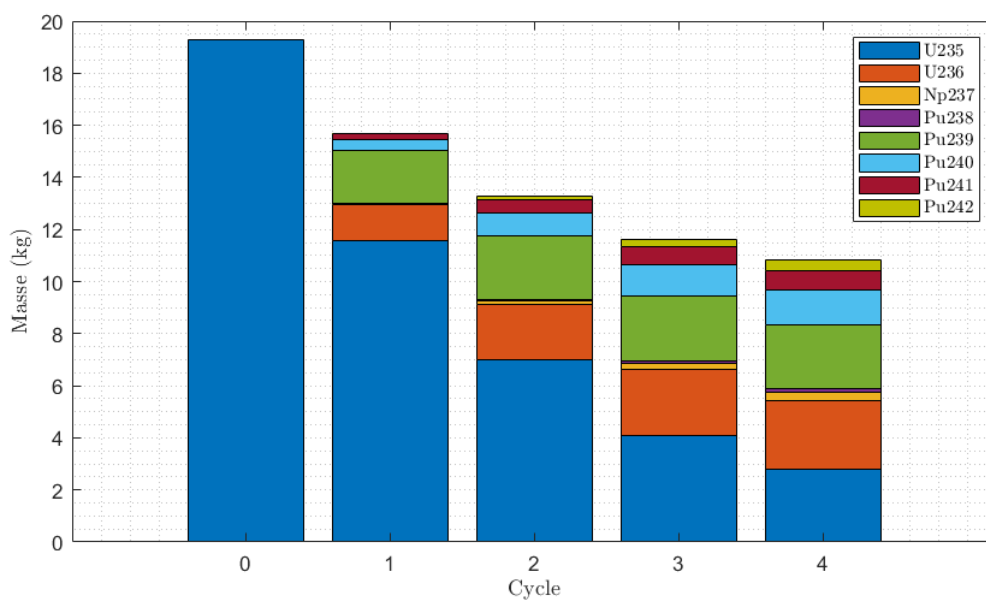
## 5.10 Exemples de résultats de calculs de cœur



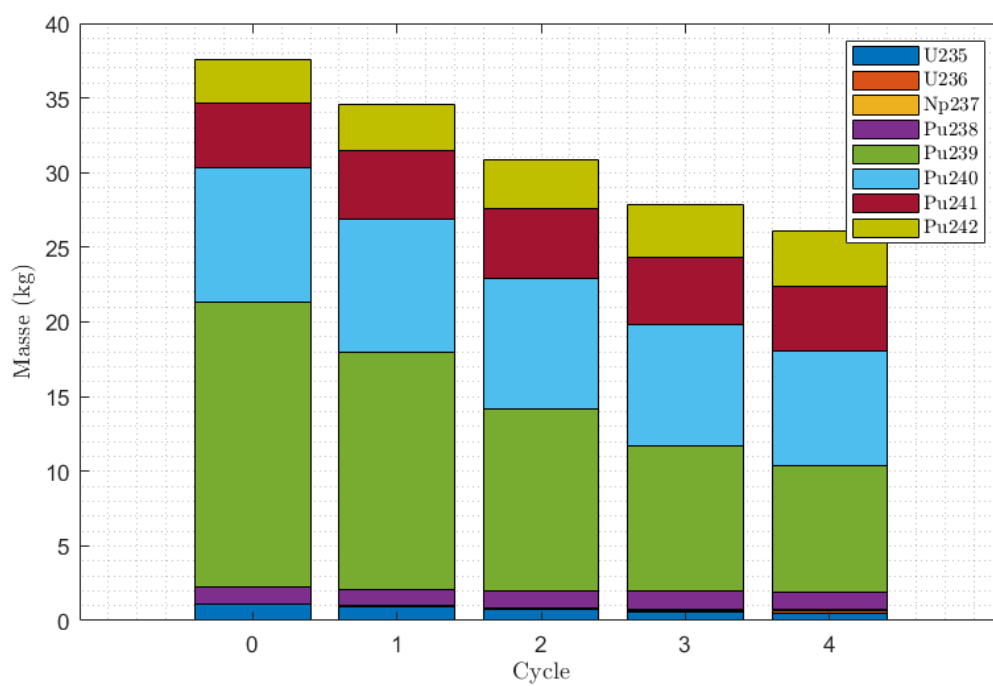
Figure 5.21 Évolution du contenu massique en actinides entre le chargement et le déchargement (cycles de 350 jours) dans les cas UOx et MOX2.

Les diagrammes de la figure 5.21 représentent l'évolution du contenu massique des assemblages chargés et déchargés par des cœurs alimentés en combustible UOx et MOX2 dans le cas de cycles de 350 jours. Quel que soit le combustible, la masse d'éléments lourds correspondant à un assemblage neuf est égale à 475.3 kg ce qui induit des chargements de  $40 \times 475.3 = 19012\text{kg}$  tous les 350 jours et donc un inventaire total chargé de 76.048t pour quatre cycles de 350 jours. Les graphiques de la figure 5.22 présentent l'évolution du contenu en actinides des assemblages avec les cycles, les graphiques de la figure 5.23 correspondent aux mêmes données, mais représentent uniquement les isotopes du plutonium afin d'observer plus nettement l'évolution des proportions relatives des différents isotopes dans le cas MOx. Enfin, les graphiques de la figure 5.24 illustrent l'évolution du contenu en actinides mineur des assemblages avec les cycles. Ces différents résultats conduisent aux observations suivantes :

- Les fissions ont consommé environ trois tonnes d'éléments lourds pendant les  $4 \times 350$  jours (seuls quelques kilogrammes disparaissent via le défaut de masse).
- Le plutonium 239 a été formé en quantité significative dans l'UOx à raison de 1.2 % des éléments lourds (hors PF). Ce qui permet d'envisager de créer du combustible MOX2 à raison de 1t de combustible MOX2 créée pour  $\frac{7.2}{1.2} = 6.0\text{t}$  de combustible UOx usagé retraité. Autrement dit, il est envisageable d'exploiter  $\frac{1}{7} = 14\%$  du parc avec des réacteurs de type MOX2. Ce qui correspond à peu de choses près à la situation actuelle en France (24 réacteurs MOxés à 30 % représentant environ 12 % des besoins en uranium) [36].
- Une quantité de  $^{241}\text{Pu}$  plus importante que nécessaire pour créer du combustible de type MOX2 semble disponible, mais il faut garder à l'esprit que le  $^{241}\text{Pu}$  se désintègre rapidement et qu'un délai minimal de cinq années de refroidissement et de deux années de fabrication est nécessaire donc la proportion de  $^{241}\text{Pu}$  disponible à ce moment sera environ 30 % inférieure ( $\exp -\frac{t}{\tau} = \exp -\frac{\ln 2}{2} = 0.70$  avec  $t_{1/2} = 14.4\text{ans}$ ).
- Dans le MOx, la production des actinides mineurs est plus importante que dans le cas UOx d'un facteur 10.
- Dans le MOx entre le chargement et le déchargement, la proportion des isotopes pairs du plutonium est assez stable (diminution de l'abondance du  $^{240}\text{Pu}$  mais augmentation de celle du  $^{242}\text{Pu}$  du même ordre de grandeur).

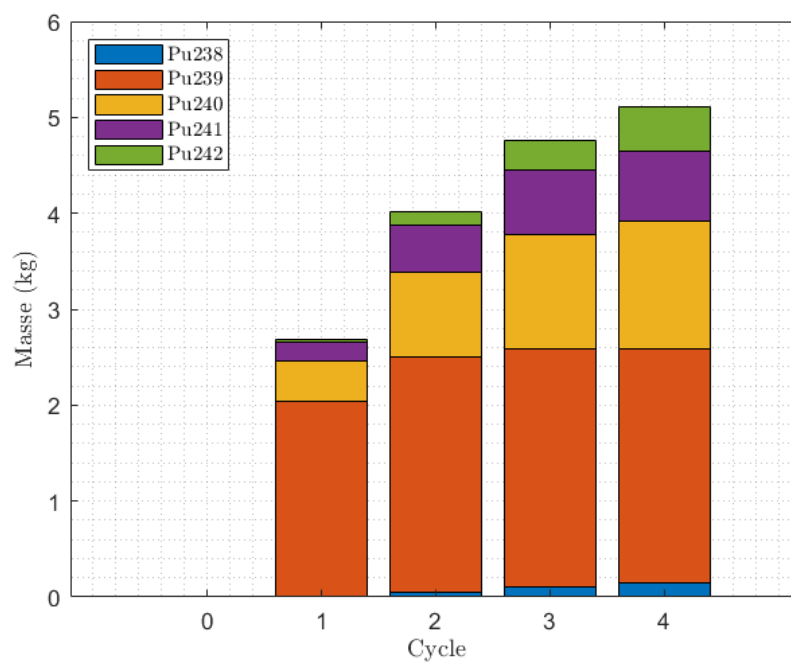


(a) cœur UOx

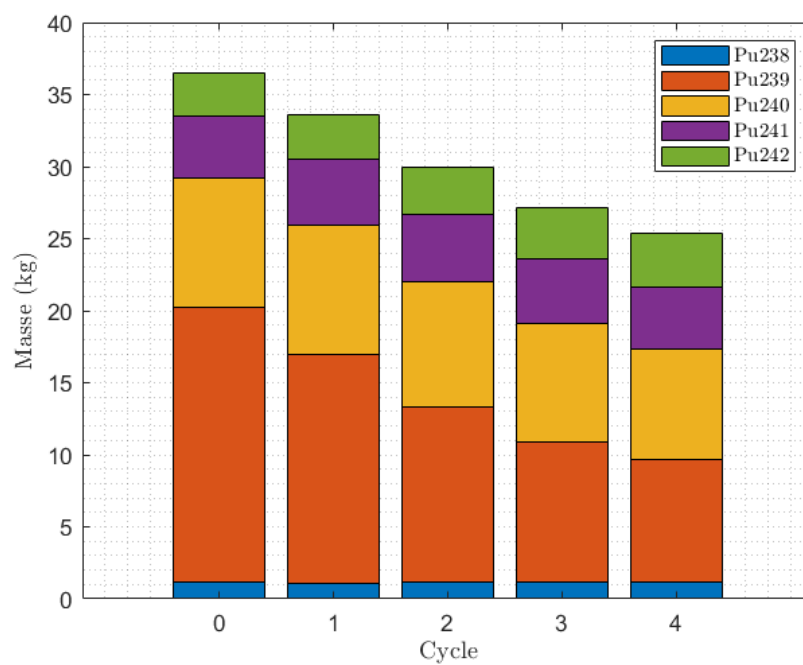


(b) cœur MOX2

Figure 5.22 Évolution du contenu massique en actinides (excepté uranium 238) des assemblages de combustible en fonction du nombre de cycles effectués (cycles de 350 jours).

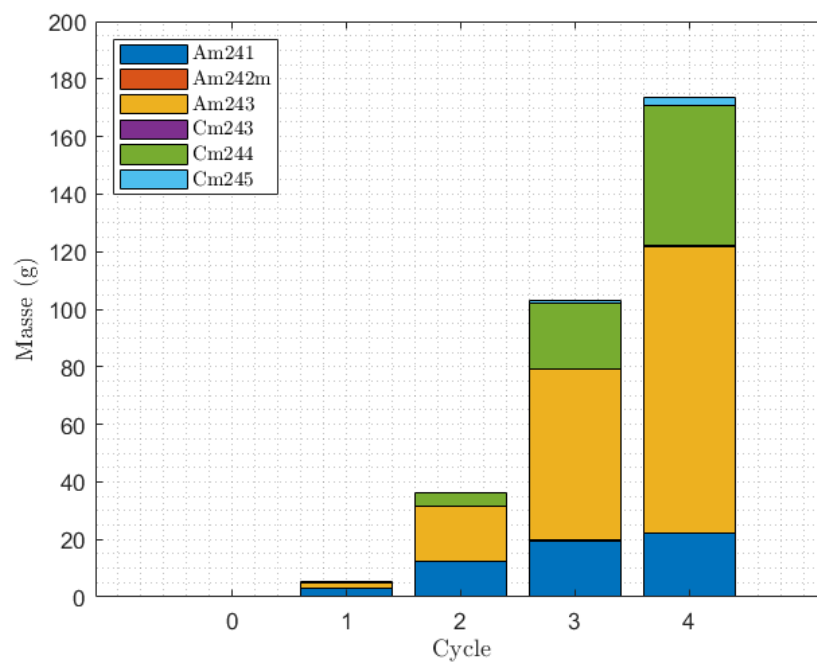


(a) cœur UOx

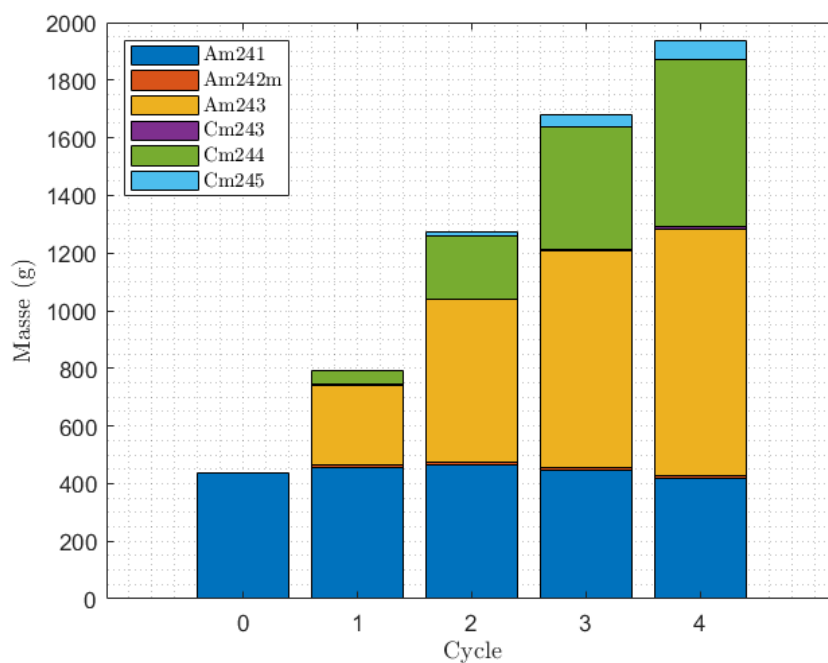


(b) cœur MOX2

Figure 5.23 Évolution du contenu massique en plutonium des assemblages de combustible en fonction du nombre de cycles effectués (cycles de 350 jours).



(a) cœur UOx



(b) cœur MOX2

Figure 5.24 Évolution du contenu massique en actinides mineurs des assemblages de combustible en fonction du nombre de cycles effectués (cycles de 350 jours).

## 5.11 Impact de la recherche de la criticité

Dans cette section, les biais générés par la simulation de réacteurs non critique par rapport à des calculs effectués avec recherche de criticité à chaque itération sont évalués (via la détermination d'une concentration de bore adéquate).

### 5.11.1 Comparaison entre un calcul de cœur à bore fixé à la valeur moyenne (intégrée sur le cycle) et un calcul de cœur critique à chaque itération

Les inventaires isotopiques issus du calcul de cœur complet et les inventaires qui sont obtenus via un calcul quasi identique (détermination du pourcentage d'enrichissement, pas de temps identiques, etc.) mais pour lequel la concentration de bore est fixée à la valeur moyenne (intégrée sur le cycle) sont ici comparés. Dans le cas UOx avec un cycle de 350 jours cette valeur moyenne est calculée comme étant égale à 700 ppm, dans le cas MOX2 cette valeur est évaluée à 785 ppm.

Le tableau 5.10 contient les écarts sur les inventaires déchargés (en gramme par isotope et par assemblage et en pourcentage relatif de l'isotope considéré). L'écart relatif est pris comme égal au rapport de la masse obtenue par le calcul à concentration de bore fixée moins celle obtenue par le calcul de cœur complet (avec détermination du bore critique à chaque itération) a celle obtenue par le calcul de cœur complet.

Tableau 5.9 Écarts sur les inventaires déchargés (hors PF) entre un calcul de cœur à concentration de bore fixée à la valeur moyenne du cycle et un calcul cœur avec recherche de criticité à chaque pas dans un cas UOx et un cas MOX2.

	UOx		MOX2	
Isotope	Écart par assemblage (g)	% (relatif)	Écart par assemblage (g)	% (relatif)
$^{234}\text{U}$	0.11	5.77	-0.04	-0.14
$^{235}\text{U}$	207.84	7.18	3.48	0.69
$^{236}\text{U}$	-7.65	-0.29	0.31	0.24
$^{238}\text{U}$	-396.73	-0.09	-249.98	-0.06
$^{237}\text{Np}$	11.52	3.84	1.62	1.87
$^{238}\text{Pu}$	8.23	5.56	5.69	0.48
$^{239}\text{Pu}$	175.70	7.22	240.68	2.81
$^{240}\text{Pu}$	5.51	0.42	-37.00	-0.48
$^{241}\text{Pu}$	51.18	7.01	73.76	1.71
$^{242}\text{Pu}$	-1.94	-0.44	-34.93	-0.94
$^{241}\text{Am}$	1.98	9.10	4.80	1.14
$^{242m}\text{Am}$	0.05	14.13	0.42	4.12
$^{243}\text{Am}$	2.66	2.76	5.20	0.61
$^{243}\text{Cm}$	0.03	6.98	0.11	1.69
$^{244}\text{Cm}$	2.83	6.07	12.42	2.18
$^{245}\text{Cm}$	0.42	15.13	3.37	5.29

La simulation de l'évolution du cœur non critique avec une concentration de bore constante égale à la valeur moyenne sur le cycle du cas critique génère des écarts sensibles de l'ordre de 7% et 2.8% pour le plutonium 239 avec un combustible UOx et MOX2 respectivement. L'uranium 235 dans le combustible UOx et les actinides mineurs comme les américiums et les curiums présentent également des déviations significatives entre les deux simulations. On peut alors se demander si utiliser une concentration de bore nulle permet d'obtenir des résultats plus proches du calcul de cœur critique à chaque instant. C'est l'objet de la section suivante.

### 5.11.2 Comparaison entre un calcul de cœur à bore fixé à 0 ppm et un calcul de cœur critique à chaque itération.

Cette comparaison consiste à évaluer les différences sur les inventaires isotopiques issus d'un calcul de cœur avec concentration de bore fixée nulle à tout instant et un calcul de cœur

avec recherche de criticité à chaque pas. Le tableau 5.10 contient les écarts sur les inventaires déchargés (en gramme par isotope et par assemblage et en pourcentage relatif de l'isotope considéré). L'écart relatif est pris comme égal au rapport de la masse obtenue par le calcul à concentration de bore fixée moins celle obtenue par le calcul de cœur avec recherche de criticité à celle obtenue par le calcul de cœur complet.

Les résultats des tableaux 5.9 et 5.10 mènent à une conclusion claire. Si le calcul de cœur est effectué sans recherche de criticité à chaque pas, il faut prendre une concentration de bore nulle. Cela assure des écarts minimaux avec le calcul de cœur critique à chaque instant. L'introduction d'une concentration de bore constante et non nulle crée un biais très important. C'est sur la base de ce constat que dans la construction des réseaux de neurones sur la base de données DRAGON pour CLASS le choix est fait de considérer uniquement des calculs de réseau à concentration de bore nulle.

Tableau 5.10 Écarts sur les inventaires déchargés (hors PF) entre un calcul de cœur à concentration de bore fixée à 0 ppm et un calcul de cœur avec recherche de criticité à chaque itération dans un cas UOx et un cas MOX2.

	UOx		MOX2	
Isotope	Écart par assemblage (g)	% (relatif)	Écart par assemblage (g)	% (relatif)
<sup>234</sup> U	-0.01	-0.48	0.01	0.03
<sup>235</sup> U	-7.19	-0.25	-0.32	-0.06
<sup>236</sup> U	0.13	0.01	-0.00	-0.01
<sup>238</sup> U	40.14	0.01	8.77	0.00
<sup>237</sup> Np	-0.92	-0.31	-0.07	-0.08
<sup>238</sup> Pu	-0.77	-0.52	-0.30	-0.03
<sup>239</sup> Pu	-9.92	-0.41	-14.76	-0.17
<sup>240</sup> Pu	-0.86	-0.06	1.07	0.02
<sup>241</sup> Pu	-3.23	-0.44	-4.72	-0.11
<sup>242</sup> Pu	-0.65	-0.15	2.27	0.06
<sup>241</sup> Am	-0.12	-0.56	-0.35	-0.08
<sup>242m</sup> Am	-0.00	-0.83	-0.03	-0.25
<sup>243</sup> Am	-0.41	-0.42	-0.17	-0.02
<sup>243</sup> Cm	-0.00	-0.62	-0.01	-0.09
<sup>244</sup> Cm	-0.36	-0.77	-0.38	-0.07
<sup>245</sup> Cm	-0.04	-1.35	-0.14	-0.22



## CHAPITRE 6 CAS ÉTUDIÉS

Afin d'étudier l'impact de l'introduction des calculs de cœur sur les scénarios nucléaires du code CLASS il a fallu définir une gamme de scénarios à étudier. En effet, une étude exhaustive de l'ensemble des scénarios actuellement développés dans CLASS était inenvisageable de par le volume de travail demandé et ne constitue pas l'objectif de ce travail. Pour rappel, ce projet vise dans un premier temps à évaluer les sources d'erreurs dans les calculs de scénarios et dans un deuxième temps à mettre en œuvre un couplage afin de réduire ces biais. Le projet se limite à étudier un scénario avec les hypothèses suivantes :

- Les réacteurs sont alimentés uniformément avec un type de combustible unique.
- Le recyclage des combustibles UOx est limité à des cas standards (voir tableau 6.1) .
- Le combustible MOx déchargé n'est pas recyclé.
- Le combustible est retraité et fabriqué à la demande.
- L'américium 241 est extrait chimiquement au début du processus de fabrication. La quantité de cet isotope présent dans le combustible chargé en réacteur correspond donc à celle générée par la désintégration du plutonium 241 pendant les deux années de fabrication uniquement.

Il est nécessaire déterminer les proportions minimales et maximales au sein du vecteur plutonium de chacun des isotopes du plutonium (plutonium 238 à 242) et de l'américium 241. En effet, les modèles de réacteurs dans CLASS sont valables sur un domaine limité dans l'espace des compositions initiales possibles. Pour les réacteurs MOX, il faut déterminer les proportions minimales et maximales au sein du vecteur plutonium de chacun des isotopes afin de construire des modélisations qui seront valables sur cet espace. Pour cela, des assemblages ayant divers niveaux d'enrichissements, d'irradiation au moment du déchargement et durées de refroidissement sont étudiés. Les caractéristiques des cas étudiés sont recensées au tableau 6.1. Il est supposé que ces exemples encadrent effectivement le problème, ce qui est vérifié empiriquement par la suite.

Tableau 6.1 Données de déchargement de combustibles UOx standards.

Combustible	Enrichissement	Burnup déchargement	Refroidissement	Fabrication
UOX3	3.50 %	36.0 GWj.t <sub>ML</sub> <sup>-1</sup>	5 ans	2 ans
UOX4	3.50 %	36.0 GWj.t <sub>ML</sub> <sup>-1</sup>	30 ans	2 ans
UOX5	4.25 %	43.2 GWj.t <sub>ML</sub> <sup>-1</sup>	5 ans	2 ans
UOX6	4.25 %	43.2 GWj.t <sub>ML</sub> <sup>-1</sup>	30 ans	2 ans
UOX7	5.00 %	50.4 GWj.t <sub>ML</sub> <sup>-1</sup>	5 ans	2 ans
UOX8	5.00 %	50.4 GWj.t <sub>ML</sub> <sup>-1</sup>	30 ans	2 ans

## 6.1 Composition des combustibles après refroidissement et avant retraitement

Tableau 6.2 Pourcentages massiques des isotopes du plutonium dans le combustible utilisé prêt à être recyclé. Les pourcentages correspondent à la proportion isotopique de l'élément considéré par rapport au vecteur plutonium total (incluant l'<sup>241</sup>Am). Les valeurs soulignées correspondent aux extremums pour un isotope donné.

Combustible	<sup>238</sup> Pu	<sup>239</sup> Pu	<sup>240</sup> Pu	<sup>241</sup> Pu	<sup>242</sup> Pu	<sup>241</sup> Am
UOX3	1.772	57.237	24.340	10.198	<u>5.643</u>	0.811
UOX4	<u>1.581</u>	<u>62.180</u>	<u>26.571</u>	<u>3.297</u>	6.135	<u>0.235</u>
UOX5	2.329	55.986	24.147	10.534	6.168	0.835
UOX6	2.085	61.016	26.513	3.417	6.726	0.242
UOX7	<u>2.925</u>	<u>54.899</u>	<u>23.939</u>	<u>10.780</u>	6.604	<u>0.853</u>
UOX8	2.625	59.980	26.422	3.505	<u>7.220</u>	0.248
% Minimum	1.581	54.899	23.939	3.297	5.643	0.235
% Maximum	2.925	62.180	26.571	10.780	7.220	0.853

Les bornes effectivement retenues incluent diverses marges de sécurité par rapport aux valeurs déterminées ci-dessus. Celles-ci s'expliquent, pour chacun des isotopes concernés, par :

- <sup>238</sup>Pu : produit par capture et désintégrations successives sur l'<sup>241</sup>Am cet isotope voit sa concentration peu varier en fonction de paramètres autres que le burnup. Une gamme de valeur allant de 1.0 à 4.5 % est retenue pour cet isotope.
- <sup>239</sup>Pu : isotope fissile prépondérant, il est produit par capture neutronique sur l'élément le plus abondant du combustible (<sup>238</sup>U), il voit sa concentration varier sensiblement en fonction de divers paramètres autres que le degré de combustion comme le degré de modération, le niveau de bore dans le modérateur, etc. [18]. Une marge de sécurité

importante est considérée sur cet isotope ce qui conduit à la gamme de valeur allant de 45.0 à 68.5 %. En réalité, ce paramètre est pris comme la différence de la somme des pourcentages des autres isotopes à l'unité.

- $^{240}\text{Pu}$  : isotope présent en quantité importante et poison neutronique, il est produit par capture neutronique sur le  $^{239}\text{Pu}$ . Sa concentration varie donc dans des proportions semblables à la concentration de celui-ci. Une marge de sécurité importante est également considérée pour cet isotope ce qui conduit à la gamme de valeur allant de 22.5 à 29.5 %.
- $^{241}\text{Pu}$  : isotope fissile, produit par capture neutronique sur le  $^{240}\text{Pu}$ , présent en quantité moins importante que le  $^{239}\text{Pu}$ , il se caractérise surtout par une durée de vie relativement courte ( $t_{1/2} = 14.4$  a). En conséquence, et compte tenu des contraintes de refroidissement et de fabrication du combustible, une grande dispersion de sa proportion est observée dans le vecteur plutonium total. Une marge de sécurité considérable est retenue sur cet isotope ce qui conduit à la gamme de valeur allant de 2.5 à 18.5 %.
- $^{242}\text{Pu}$  : isotope présent en quantité peu importante, mais poison neutronique, il verra sa proportion varier dans les mêmes proportions que son noyau père le  $^{241}\text{Pu}$ . Une marge de sécurité également considérable est retenue pour cet isotope ce qui conduit à la gamme de valeur allant de 4.0 à 10.5 %.
- $^{241}\text{Am}$  : isotope présent en quantité très peu importante, mais poison neutronique, il verra sa proportion varier avec la désintégration naturelle de son noyau père le  $^{241}\text{Pu}$ . Une marge de sécurité également considérable est retenue pour cet isotope ce qui conduit à la gamme de valeur allant de 0.0 à 1.50 %.

## 6.2 Isotopes étudiés individuellement

Comme cela a été présenté dans la section 3.3.2, à la fin du calcul de réseau, les sections correspondant à l'ensemble des isotopes sont homogénéisées en une section efficace représentative de l'ensemble du combustible pour le calcul de cœur. Or dans le cadre de ce projet, nous souhaitons avoir accès aux concentrations des isotopes d'intérêt au déchargement. Dans DONJON5, l'accès à ces compositions est conditionné à la présence de la section efficace microscopique de l'isotope. Afin de réduire la taille de l'objet MULTICOMPO, enjeu majeur de ce projet, le nombre d'isotopes suivis individuellement est tout de même réduit au minimum. La figure 6.1 permet d'identifier les isotopes à suivre. Celle-ci présente les interactions entre les principaux actinides et actinides mineurs en REP.

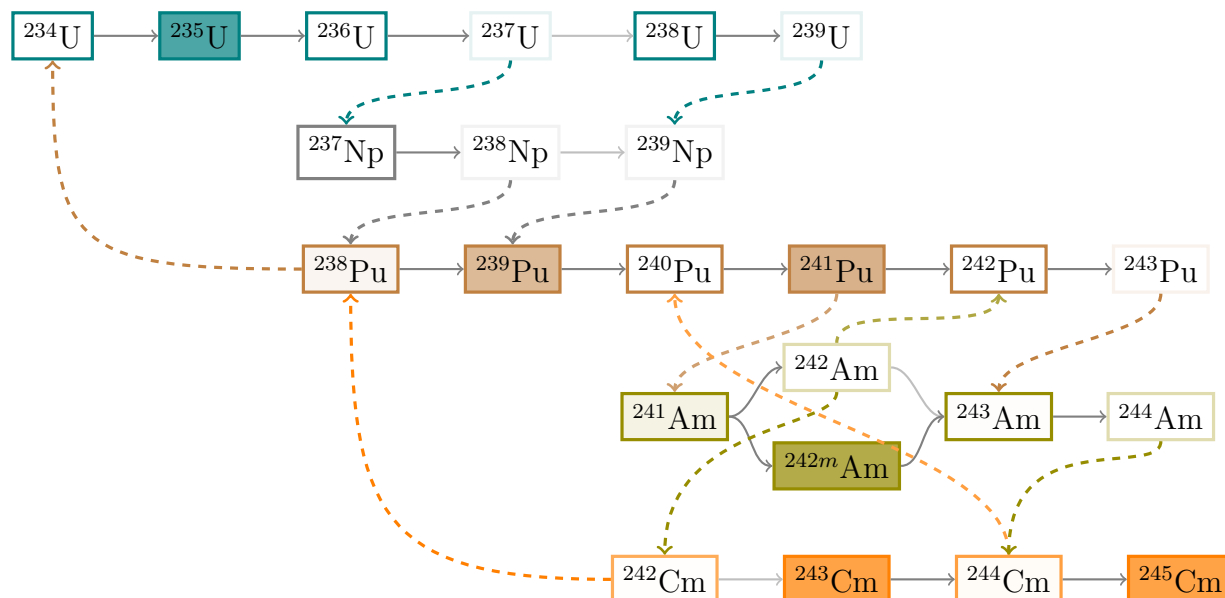


Figure 6.1 Évolution des principaux actinides en REP. Sont représentés ; en trait pointillé les désintégrations naturelles et en trait plein les réactions de capture neutronique. Le degré de coloration de la case contenant l'isotope est proportionnel à son taux de fission et l'épaisseur du contour à sa stabilité.

La totalité des isotopes constituant le combustible neuf est suivi individuellement ( $^{235}\text{U}$ ,  $^{238}\text{U}$ ,  $^{238}\text{Pu}$ ,  $^{239}\text{Pu}$ ,  $^{240}\text{Pu}$ ,  $^{241}\text{Pu}$ ,  $^{242}\text{Pu}$  et  $^{241}\text{Am}$ ). Les actinides et actinides mineurs ayant des durées de vie significatives ou un rôle important du point de vue de la gestion des déchets sont également suivis. Les isotopes dont la durée de vie est trop courte ce qui fait que leur probabilité de capture neutronique est négligeable ne sont pas suivis. Ceci conduit à ajouter uniquement les uranium 236, neptunium 237, américium 242 métastable et 243 ainsi que les curium 243, 244 et 245 à la liste précédemment établie. Enfin, le xénon 135 est ajouté en raison de son importance primordiale dans les effets de réactivité de début de cycle détaillés dans la section 5.9.1. L'uranium 234 est également suivi puisqu'il apparaît spontanément dans le combustible par désintégration naturelle de l'uranium 238 et est particulièrement pénalisant neutroniquement. Ces 17 isotopes couvrent la majorité de l'inventaire radiotoxique en dehors des produits de fission et permettent de mener des études de cycle [37]. Les modèles de réacteurs développés avant ce travail utilisaient des interpolations de sections efficaces pour résoudre les équations d'évolution afin d'en extraire les inventaires en fin d'irradiation. Il est alors nécessaire de construire des interpolateurs de sections efficaces de chacun des noyaux présents dans les chaînes d'évolution d'intérêt. Ceci conduit à ajouter les américium 242, curium 242, neptunium 238 et neptunium 239. Le calcul de la base de données ainsi créée nous a permis de créer les interpolateurs de section efficace et de coefficient de multiplication

infinie nécessaires pour les modèles classiques de CLASS utilisant les PMC.

Parmi les isotopes suivis, tous ne sont pas prépondérants pour la fission. La figure 6.2 présente les sections efficaces de fission des isotopes des plutonium, américium et curium suivis dans DONJON5. Les données proviennent de la bibliothèque EDNF/B-VII.1. Sur ces graphiques il est très clair que les plutoniums et curium dont le nombre de masse est impair ont une section efficace de fission importante et que les isotopes de ces éléments dont le nombre de masse est pair ont des sections efficaces de fission très faibles comme cela est attendu [15]. C'est notamment le cas pour les plutoniums 239 et 241 qui sont à l'origine de la grande majorité des fissions dans le cas du MOx. A contrario, pour l'américium ce sont les isotopes dont le nombre de masse est pair qui ont des sections efficaces importantes. Mentionnons le cas exceptionnel de l'américium 242 métastable, dont la section efficace de fission est supérieure à celles des plutonium 239 et 241. Toutefois, compte tenu de la présence très faible de cet élément dans le combustible (voir figure 5.24) il n'a pas d'impact majeur sur le flux. Ceci ne remet donc pas en cause les constats effectués à la section 4.6.

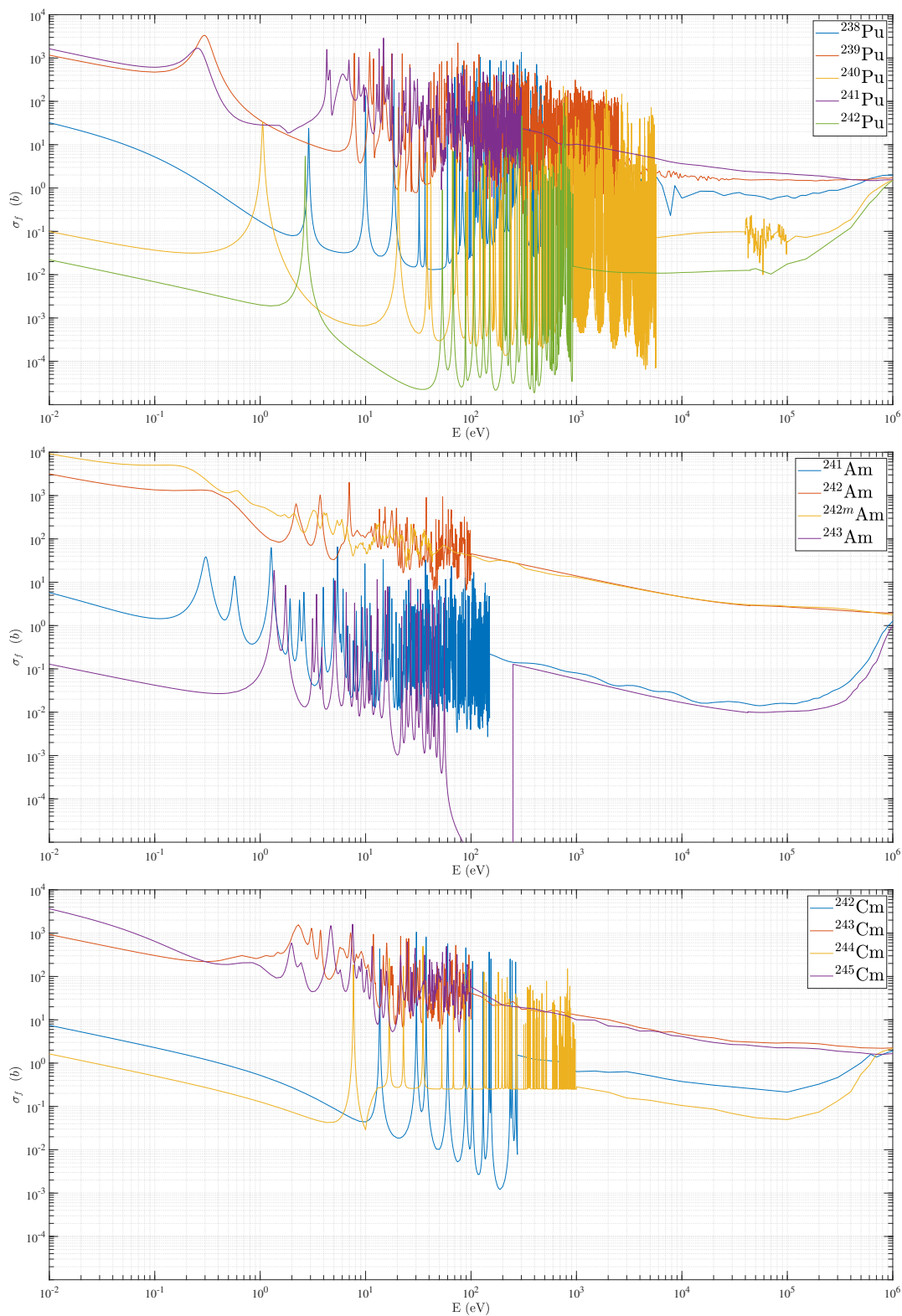


Figure 6.2 Sections efficaces de fission des isotopes du plutonium, de l'américium et du curium en fonction de l'énergie ( $1 \text{ meV} < E < 1 \text{ MeV}$ ).

## 6.3 Échantillonnage de la MULTICOMPO

### 6.3.1 Discrétisation en burnup

L'échantillonnage temporel (des temps équivalents pleine puissance sont utilisés ce qui rend l'étude temporelle équivalente à l'étude en burnup) retenu dans le calcul de la MULTICOMPO est celui qui a été déterminé dans le cadre de l'étude du calcul de réseau (voir section 4). En effet, dans les calculs de cœur, le nombre de pas temporel doit être minimisé tout en préservant la précision sur les inventaires. Comme on effectue toujours des pas temporels de diffusion plus grossiers que ceux déterminés à la section 4.5. Retenir l'échantillonnage du calcul réseau s'avère amplement suffisant. Pour rappel les valeurs correspondantes sont répertoriées dans le tableau 4.5.

### 6.3.2 Perturbation via l'enrichissement

Dans le cas du combustible UOx, le lien entre enrichissement et burnup maximal atteignable est supposé direct et nous ne considérons pas la présence éventuelle d'assemblages gadoliné pourtant nécessaires dans les plans de chargement des réacteurs à haut burnup (afin de limiter la concentration de bore en début d'irradiation). Pour le combustible MOx, le raisonnement a consisté à déterminer l'enrichissement minimal en prenant l'enrichissement nécessaire pour le cycle le plus court avec la meilleure qualité de MOx (MOX1) et à chercher l'enrichissement maximal comme celui nécessaire pour le cycle le plus long et la moins bonne qualité de MOx (MOX3).

Ainsi, des calculs de cœurs chargés uniformément avec ces assemblages MOX1 et MOX3 et pour des durées de cycle de 300 et 400 jours permettent de déterminer les bornes d'enrichissement pour le MOx. Les résultats obtenus, après arrondi, sont récapitulés dans le tableau 6.3.

Tableau 6.3 Pourcentages extremums d'enrichissement des différents combustibles (uranium 235 pour l'UOx, vecteur plutonium total pour le MOx).

Combustible	Enrichissement min ( $\%_{ML}$ )	Enrichissement max ( $\%_{ML}$ )
UOx	3.00	5.00
MOx	4.50	13.50

Le choix de la discrétisation sur l'enrichissement s'appuie sur les résultats présentés dans les tableaux 5.5 (UOx) et 6.4 (MOx). Ce dernier, quantifie l'impact d'un échantillonnage

sur l'enrichissement plus grossier (1.00 ou 1.50 %) que l'échantillonnage de référence (0.50 %) dans le cas du MOx. Ces résultats montrent que les écarts constatés sur les inventaires isotopiques calculés avec les différents pas d'enrichissement et des méthodes cubiques restent inférieurs à 0.1 % (relatif) ce qui est extrêmement faible.

Tableau 6.4 Écart relatif (%) au calcul effectué avec un pas d'enrichissement de 0.50 % sur les inventaires isotopiques au moment du rechargement pour un cœur MOX1.

Δ enrichissement	1.00 %				1.50 %			
Isotope	<sup>238</sup> Pu	<sup>239</sup> Pu	<sup>240</sup> Pu	<sup>241</sup> Pu	<sup>238</sup> Pu	<sup>239</sup> Pu	<sup>240</sup> Pu	<sup>241</sup> Pu
Écart relatif à 0.50 %	-0.02	0.07	-0.02	-0.01	-0.02	0.06	-0.01	-0.01

Une discrétisation de la perturbation en enrichissement de la MULTICOMPO de 1.00 % pour l'UOx et de 1.00 % ou 1.50 % pour le MOx est retenue. Choisir le pas le plus large possible permet de limiter le temps de calcul et la taille de l'objet MULTICOMPO. Dans un premier temps les deux versions pour la MULTICOMPO MOx sont conservées. Le but est de démontrer la faisabilité du calcul de cœur avec des pas plus fins dans les huit dimensions de la grille. L'échantillonnage retenu est résumé dans le tableau 6.5.

Tableau 6.5 Discrétisation des enrichissements pour le calcul des MULTICOMPOs.

Enrichissement (% ML)	Perturbations considérées
Uranium 235	3.00, 4.00 et 5.00
Plutonium (minimale)	4.50, 6.00, 7.50, 9.00, 10.50, 12.00 et 13.50
Plutonium (maximale)	4.50, 5.50, 6.50, 7.50, 8.50, 9.50, 10.50, 11.50, 12.50 et 13.50

### 6.3.3 Perturbation via la concentration de bore

Le bore est utilisé dans les REP comme premier moyen de pilotage de la réactivité sous forme d'absorbant soluble dans le modérateur. La prise en compte de la perturbation en bore dans le calcul de l'objet MULTICOMPO est nécessaire. Cela revient à définir un certain nombre de pas de calcul (comme cela est détaillé pour l'enrichissement du combustible et les proportions des différents isotopes du plutonium) et à effectuer le calcul d'évolution complet de chaque assemblage en considérant successivement chacune des concentrations en bore testées. La prise en compte de l'effet du bore est coûteux en temps de calcul (car cela rajoute une dimension à notre problème) et cela multiplie le temps de calcul de la MULTICOMPO par le nombre de perturbations en bore. La prise en compte de cette perturbation est menée



avec trois (échantillonnage minimal) ou cinq (échantillonnage maximal) points de calcul. Ce qui conduit aux valeurs répertoriées dans le tableau 6.6.

Tableau 6.6 Discrétisation des perturbations en bore pour le calcul des MULTICOMPOs.

Concentration en bore (ppm)	Perturbations considérés
Échantillonnage minimal	0, 1375 et 2750
Échantillonnage maximal	0, 650, 1300, 1950 et 2600

#### 6.3.4 Perturbation via le vecteur isotopique du plutonium

Les échantillonnages pour chacun des isotopes du plutonium et de l'américium au sein de la MULTICOMPO sont déterminés via les valeurs obtenues dans le cadre des combustibles de référence (voir tableau 6.2), sur lesquels des marges de sécurité additionnelles sont considérées (de 0.25 à 2.00 % suivant les cas) ce qui conduit aux valeurs répertoriées dans les tableaux 6.7 et 6.8. Le premier ensemble est une version minimaliste avec notamment une interpolation qui ne peut être que linéaire pour le plutonium 238 et l'américium 241. Le second échantillonnage permet, quant à lui, l'interpolation cubique de chacun des paramètres et assure une discrétisation à mieux que 5% du vecteur plutonium total pour chacun des isotopes échantillonnés.

Tableau 6.7 Discrétisation des pourcentages massiques au sein du vecteur plutonium pour le calcul de la MULTICOMPO MOx (échantillonnage minimal).

Isotope	Perturbations (% du vecteur plutonium total) considérées
<sup>238</sup> Pu	0.50 et 5.50
<sup>240</sup> Pu	21.50, 26.50 et 31.50
<sup>241</sup> Pu	1.50, 10.50 et 19.50
<sup>242</sup> Pu	3.50, 8.00 et 12.50
<sup>241</sup> Am	0.01 et 1.75

Tableau 6.8 Discrétisation des pourcentages massiques au sein du vecteur plutonium pour le calcul de la MULTICOMPO MOx (échantillonnage maximal).

Isotope	Perturbations (% du vecteur plutonium total) considérées
$^{238}\text{Pu}$	0.50, 3.00 et 5.50
$^{240}\text{Pu}$	21.50, 26.50 et 31.50
$^{241}\text{Pu}$	1.50, 7.50, 13.50 et 19.50
$^{242}\text{Pu}$	3.50, 8.00 et 12.50
$^{241}\text{Am}$	0.01, 0.88 et 1.75

Soit un total de  $2^2 \times 3^3 = 108$  combinaisons pour la version minimale et  $3^4 \times 2^2 = 324$  combinaisons pour la version maximale (la valeur pour le plutonium 239 étant toujours prise comme égale à la différence de l'enrichissement total en plutonium et de la somme des autres isotopes). Dans la version minimale, seuls deux points sont utilisés pour les proportions du  $^{238}\text{Pu}$  et de l' $^{241}\text{Am}$ . Cela permet de maintenir une taille de MULTICOMPO raisonnable. Il est néanmoins intéressant d'étudier les écarts obtenus sur les inventaires des différents isotopes en fonction de l'échantillonnage.

Le pas maximal considéré (8.50 % pour le plutonium 241 dans la version minimale, 6.00 % dans la version maximale) correspond à un pas de pourcentage parmi les éléments lourds de 1.15 % seulement dans le cas minimaliste et 0.80 % dans le second cas (obtenu par la simple relation % Pu maximal fois  $\Delta\%$  Pu). L'étude ayant montré que pour l'uranium 235 de l' $\text{UOx}$ , un pas de 1.0 % est amplement suffisant. Cela justifie donc, à priori, le caractère adéquat de la discrétisation adoptée.

Les bornes retenues incluent presque entièrement les cas de référence précédemment étudiés. Seules les proportions de plutonium 240 dans le combustible MOX3 et de plutonium 242 et américium 241 dans le combustible MOX4 s'écartent de l'échantillonnage proposé. Pour autant, ces combustibles sont peu vraisemblables (ils correspondent au recyclage de combustible usé très ancien, très brûlé et comportant beaucoup d'américium 241, c'est-à-dire ayant beaucoup attendu entre fabrication et chargement en cœur). Or, ces cas sont exclus des études de scénarios ici traitées.

### 6.3.5 Choix de l'échantillonnage final

Il reste à trancher entre l'échantillonnage qualifié de minimal et celui qualifié de maximal pour le calcul de la MULTICOMPO MOx.

Pour rappel ces deux MULTICOMPOs diffèrent par :

- L'échantillonnage du bore avec trois points dans le premier et cinq dans le second.
- L'échantillonnage de l'enrichissement avec sept points dans le premier cas et dix dans le second.
- L'échantillonnage du plutonium 238 et de l'américium 241 avec deux points dans le premier cas et trois dans le second.
- L'échantillonnage du plutonium 241 avec trois points dans le premier cas et cinq dans le second.

Pour la concentration de bore, l'enrichissement et le plutonium 241, les effets attendus sont faibles puisqu'il s'agit uniquement de raffiner l'échantillonnage cubique. A contrario, dans le cas du plutonium 238 et de l'américium 241 cela permet de passer d'une interpolation linéaire à une interpolation cubique. Néanmoins, comme nous l'avons évoqué précédemment, ces isotopes sont grandement dilués (moins de 5 % du plutonium représentant lui-même moins de 13 % des éléments lourds totaux). Il est donc raisonnable d'envisager que les erreurs engendrées par une interpolation linéaire seront plus faibles que dans le cas du plutonium 239 (représentant 30 à 60 % du plutonium). Afin de trancher définitivement cette question, des calculs de cœur sont menés avec chacune de ces MULTICOMPOs dans le cas d'un combustible MOX2 et pour une durée de cycle de 350 jours. Les écarts sur les résultats générés sont répertoriés dans les tableaux 6.9 et 6.10 où la discrétisation la plus fine est prise comme référence.

Tableau 6.9 Écarts sur les enrichissement et les concentrations de bore entre des calculs effectués avec la MULTICOMPO MOx avec échantillonnage minimal et celle avec échantillonnage maximal.

Grandeur	Précision	Écart
Concentration de bore (ppm)	5.0	2.5
Enrichissement (% ML)	0.01	0.00

Tableau 6.10 Écarts relatifs sur les inventaires des isotopes du plutonium entre des calculs effectués avec la MULTICOMPO MOx avec échantillonnage minimal et celle avec échantillonnage maximal.

Isotope	<sup>238</sup> Pu	<sup>239</sup> Pu	<sup>240</sup> Pu	<sup>241</sup> Pu	<sup>242</sup> Pu	<sup>241</sup> Am
Écart relatif (%)	0.01	-0.30	-0.02	0.00	-0.02	0.01

La lecture du tableau 6.9 montre sans ambiguïté que la version la moins échantillonnée de la MULTICOMPO retranscrit parfaitement les résultats en réactivité obtenus avec la version

la plus discrétisée. En effet, les écarts constatés sur les calculs de concentration de bore critique sont au maximum de 2.5 ppm et ce quel que soit le moment du cycle alors même que ce paramètre est déterminé dans le cadre de la procédure détaillée dans la section 5.8 avec une précision de 5.0 ppm. Concernant les enrichissements, les deux calculs fournissent exactement la même valeur de 7.68 %, et sont effectués selon la procédure détaillée en 5.7 avec une précision de 0.01 %. En ce qui concerne les isotopes, la lecture du tableau 6.10 montre des écarts faibles, mais quantifiables. Notons que la déviation s'avère plus importante pour le plutonium 239 que pour les plutonium 238 et l'américium 241 (pour lesquels une forte variation était attendue) avec environ 0.30 % (relatifs) contre 0.01 %. Ceci s'explique par le fait qu'augmenter le nombre de point dans les autres dimensions augmente à chaque fois le nombre de points de l'échantillonnage en plutonium 239 puisque celui-ci est pris comme la différence à l'unité de la somme des autres pourcentages. Dans tous les cas ces erreurs sont négligeables.

Le choix est fait de conserver l'échantillonnage qualifié de minimal dans les calculs de cœurs et dans les calculs couplés avec CLASS. Cela permet des temps d'interpolation dans le module NCR: et, in fine, des temps de calcul de scénario environ 8 fois plus faibles. Néanmoins, cette démarche prouve que l'utilisation de MULTICOMPO d'une taille conséquente (4 go en l'occurrence) est possible ce qui peut permettre d'envisager d'ajouter une dimension au problème comme la perturbation en température par exemple.

Enfin, une tentative a été faite de construire des réseaux de neurones sur la base de ces échantillonnages réguliers. Néanmoins, la prédiction de la réactivité et des sections efficaces à un groupe fondée sur ces bases de données s'est avérée très mauvaise. En effet, c'est un phénomène connu que les PMC [13] nécessitent des bases de données d'entraînement contenant un grand nombre d'événements et les sorties associées. L'échantillonnage doit être uniforme et homogène, mais irrégulier. Dans notre cas, les événements sont constitués de l'isotopie de départ du combustible, du niveau de burnup et de la concentration de bore dans le modérateur et les sorties correspondent aux réactivités, coefficients de diffusion et sections efficaces condensées et homogénéisées. Finalement, 5000 évolutions complètes pour le MOx et 800 pour l'UOx, basées sur des isotopies et enrichissements générés aléatoirement (avec une méthode LHS [38]) sont réalisées avec exactement le même jeu de paramètre afin de disposer de bases de données d'entraînement satisfaisantes. La comparaison entre les résultats issus des PMC entraînés sur ces bases de données et des calculs DONJON5 constitue le cœur de ce travail et est présenté dans les sections suivantes dans différents contextes.

## CHAPITRE 7 RÉSULTATS ET COMPARAISON ENTRE LES CALCUL CLASS-PMC ET LES CALCULS CLASS-DONJON5

Dans ce chapitre il s'agit d'étudier des scénarios faisant intervenir des réacteurs UOx et MOx fondés avec des modèles de réacteurs appelant le code de diffusion DONJON5 et de comparer les résultats obtenus à ceux générés via des PMC sur des bases de données similaires. Pour comprendre les écarts, l'étude se porte d'abord sur des scénarios élémentaires dans lesquels interviennent seulement un réacteur puis sur des scénarios complexes dans lesquels ces réacteurs, mais également leurs interactions sont prises en compte. Pour ce faire, un jeu de combustibles de référence est utilisé. Le choix est fait de mener l'étude sur un combustible UOx et sur quatre isotopies de combustible MOx distinctes notées MOX1, MOX2, MOX3\* et MOX4\*. Les combustibles MOX1 et MOX2 sont les combustibles de référence utilisés dès les premières parties de ce document. Les combustibles MOX3 et MOX4 ne peuvent être utilisés en l'état, car comme mentionné précédemment, les proportions isotopiques des plutoniums 240 dans le cas MOX3 et des plutonium 242 et américium 241 dans le cas MOX4 ne sont pas comprises dans le domaine de la MULTICOMPO créée pour cette étude. Les combustibles MOX3\* et MOX4\* sont des compositions très légèrement modifiées de MOX3 et MOX4 afin d'appartenir au domaine. Les isotopies en plutonium des différents combustibles MOx utilisés dans cette partie sont récapitulées au tableau 7.1.

Tableau 7.1 Vecteurs isotopiques du plutonium des assemblages MOX1, MOX2, MOX3\* et MOX4\*. La valeur indiquée correspond au pourcentage massique de l'élément considéré parmi le vecteur plutonium total (incluant l'américium 241)

Dénomination	<sup>238</sup> Pu	<sup>239</sup> Pu	<sup>240</sup> Pu	<sup>241</sup> Pu	<sup>242</sup> Pu	<sup>241</sup> Am
MOX1	1.98	62.25	22.50	8.00	5.00	0.27
MOX2	3.12	51.84	24.32	11.75	8.04	1.18
MOX3*	2.87	49.99	30.91	4.54	10.92	0.77
MOX4*	4.00	38.53	24.56	19.18	12.00	1.73

### 7.1 Calcul de la constante $k_{\text{seuil}}$

Comme cela a été détaillé dans la section 2.1.2, les modèles de réacteurs fondés sur réseaux de neurones utilisés dans CLASS s'appuient sur un paramètre fondamental dénommé  $k_{\text{seuil}}$ . Ce développement consiste à déterminer le  $k_{\text{seuil}}$  issu des calculs de la base donnée DRAGON5 utilisée par les modèles et plus particulièrement d'étudier la variabilité de ce paramètre en

fonction de la nature du combustible (UOx ou MOx), de sa qualité isotopique et pour finir comparer les résultats à la valeur précédemment utilisée dans les scénarios de CLASS que l'on note  $k_{\text{seuil}}^0$  (pour rappel  $k_{\text{seuil}}$  quantifie la réserve de réactivité servant à compenser les pertes neutroniques non simulées). Rigoureusement le calcul de  $k_{\text{seuil}}$  s'effectue selon :

$$k_{\text{seuil}} = \frac{1}{N_{\text{ass}}} \sum_{n=1}^{N_{\text{ass}}} k_n(t_{\text{rechargement}}) \quad (7.1)$$

Dans un calcul de cœur l'irradiation diffère selon la position de l'assemblage. Des résultats de calculs de cœur DONJON5 effectués avec les plans de chargement présentés en 5.6 montrent que l'irradiation selon les cycles peut varier jusqu'à 50% par rapport au rythme moyen. C'est par exemple le cas des assemblages UOx qui après un cycle de 350 jours ont un burnup moyen de l'ordre de  $17 \text{ GWj.t}_{\text{ML}}^{-1}$  alors qu'au rythme moyen une valeur de  $\frac{49.8}{4} = 12.7 \text{ GWj.t}_{\text{ML}}^{-1}$  est attendue. Le niveau d'irradiation des différents assemblages au sein d'un même cycle peut également varier de l'ordre de 20%. Notons que les plans de chargement construits dans ce projet l'ont été, d'une part, de manière à ce que le facteur de forme soit le plus proche possible de la valeur unitaire et, d'autre part, en veillant à minimiser les écarts au moment du déchargement. Il n'était pas possible de contraindre le plan de chargement avec un troisième critère correspondant à limiter au maximum les écarts entre l'évolution à chaque cycle et l'évolution moyenne.

Afin de déterminer les valeurs de  $k_{\text{seuil}}$  pour plusieurs MOx très différents et pour l'UOx on procède de la manière suivante. Les vecteurs isotopiques des combustibles MOX1, MOX2, MOX3\*, MOX4\* et UOX sont utilisés pour effectuer un calcul d'enrichissement avec DONJON5. Une fois cette valeur connue, un calcul de réseau utilisant ce vecteur isotopique et cet enrichissement à bore nul (et un autre à 650 ppm) est effectué, ceci conduit aux variations de  $k_{\text{eff}} = k_{\infty}$  présentées à la figure 7.1 (dans le cas d'un déchargement à  $49.8 \text{ GWj.t}_{\text{ML}}^{-1}$ ). Sur cette figure, les  $k_{\infty}$  des assemblages au moment du déchargement sont relevés puis les  $k_{\text{seuil}}$  calculés pour chacun des combustibles. Les  $k_{\text{seuil}}$  calculés sans approximation supplémentaire le sont à partir des valeurs correspondants aux burnups de déchargement effectifs de chaque lot (signalés par des symboles losanges, croix, ronds, carrés ou étoiles sur les courbes). A contrario, le  $\tilde{k}_{\text{seuil}}$  calculé dans l'hypothèse d'un rythme d'irradiation moyen (pour le cœur, pas nécessairement pour les assemblages) l'est à partir des valeurs relevées après 350, 700, 1050 et 1400 jours équivalents pleine puissance (signalés par des points gris).

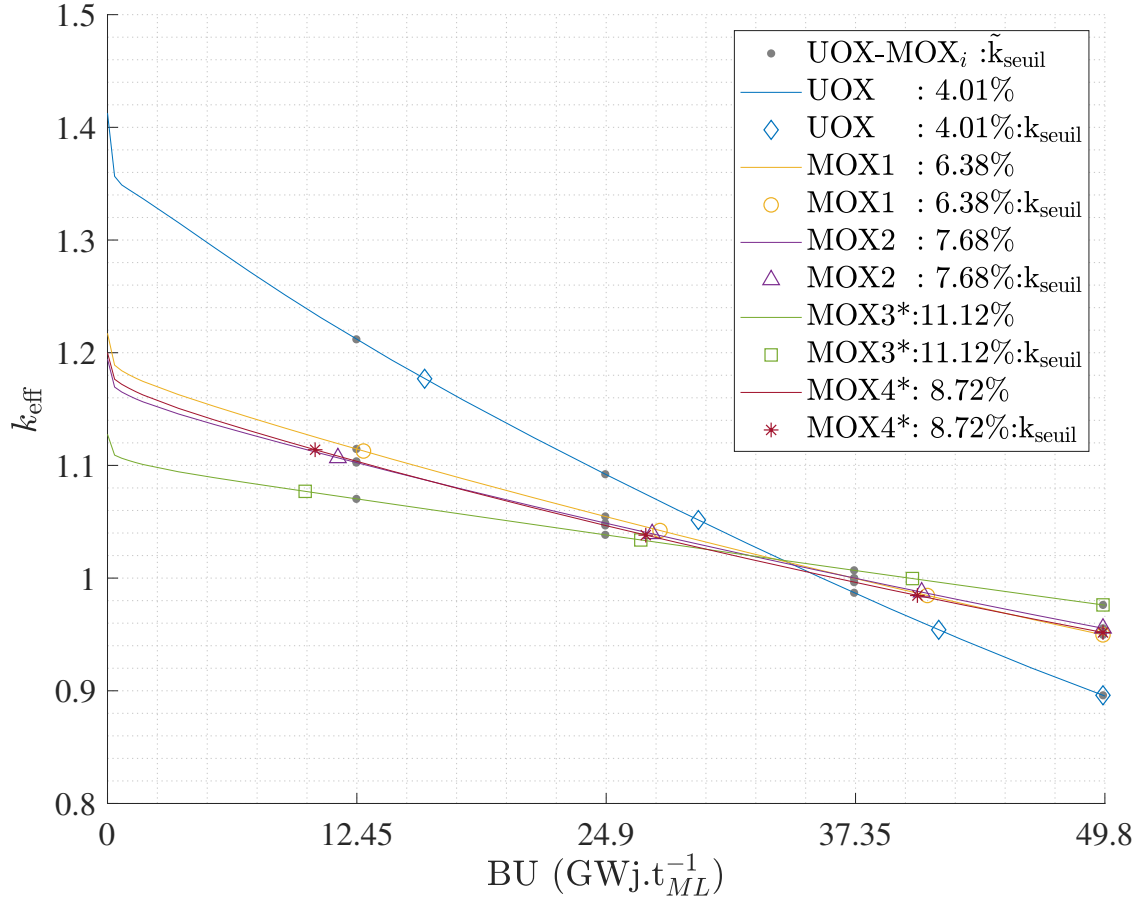


Figure 7.1  $k_{\text{eff}}$  issus de calculs DRAGON5 pour les combustibles UOX, MOX1, MOX2, MOX3\* et MOX4\* utilisés dans la détermination de  $k_{\text{seuil}}$  et  $\tilde{k}_{\text{seuil}}$ , en l'absence de bore et pour des burnups de déchargement de 49.8 GWj.t<sub>ML</sub><sup>-1</sup> (i.e. des temps cycles de 350 jours équivalents pleine puissance).

Dans le cas d'un calcul de réseau extrapolé au cœur complet, le burnup au moment du rechargement pour chacun des assemblages est inconnu. Il est donc impossible d'aller extraire la valeur de réactivité correspondant. Il est alors nécessaire de simplifier le calcul de  $k_{\text{seuil}}$  avec les hypothèses suivantes : le niveau d'irradiation est considéré constant entre les cycles et la contribution de chaque cycle est supposée équivalente. Autrement dit, la somme sur les 157 assemblages se transforme en une somme sur quatre termes correspondant au  $k_{\infty}$  moyen des lots au moment du rechargement. L'hypothèse de contribution équivalente des cycles revient à négliger le fait que seul 37 assemblages constituent le quatrième lot alors que 40 assemblages constituent les lots 1, 2 et 3. L'hypothèse d'irradiation constante permet non seulement de traiter les assemblages par lot plutôt que séparément, mais également de ne pas chercher le burnup exact après un, deux, trois ou quatre cycles.

Les tableaux 7.2, 7.3 et 7.4 présentent les résultats obtenus avec des cycles de 350, 320 et 390 jours équivalents pleine puissance respectivement temps qui correspond à des burnups de 49.8, 45.5 et 55.4 GWj.t<sub>ML</sub><sup>-1</sup>. Dans ces tableaux différentes valeurs sont présentées. La première,  $k_{\text{seuil}}$  correspond à un calcul sans simplification qui suppose la connaissance des burnup moyen de chaque lot d'assemblage à chaque rechargement partiel. Cela est uniquement possible en disposant des résultats d'un calcul de cœur. Le processus consiste, ici, à lire dans des résultats de calcul de cœur DONJON5 le burnup au moment du rechargement pour chacun des assemblages, puis, pour chacun de ces assemblages à relever le  $k_{\infty}(BU_{\text{rechargement}})$  correspondant sur le calcul de réseau (en effectuant la conversion entre burnup et jour équivalent pleine puissance). Les autres valeurs correspondent à des calculs simplifiés où le problème est traité par lot et non plus par assemblage pour deux concentrations de bore distinctes.

Dans les tableau 7.2, 7.3 et 7.4 sont présentés :

- Les  $k_{\text{seuil},0}$  calculés sans approximation en relevant les valeurs de  $k_{\infty}$  correspondant au niveau d'irradiation réel (déterminé via calcul de cœur) de chacun des assemblages sur un calcul de réseau où la concentration de bore est nulle.
- Les  $\tilde{k}_{\text{seuil},0}$  calculés dans l'hypothèse d'irradiation moyennée en relevant seulement quatre valeur de  $k_{\infty}$  après 350, 700, 1050 et 1400 jours équivalents pleine puissance. Le calcul est également effectué avec une concentration de bore nulle.
- $\delta k_{\text{seuil}}$  : l'écart entre les deux valeurs précédentes en mk ( $10^{-3}$ ), ici le mk est l'unité pertinente puisque la valeur  $k_{\text{seuil}}$  est en général fournie avec une précision à 1 à 10 mk.
- Les  $\tilde{k}_{\text{seuil},650}$  obtenus dans le cas simplifié et pour un calcul d'assemblage avec une concentration de bore constante de 650 ppm.

Tableau 7.2  $k_{\text{seuil}}$  et  $\tilde{k}_{\text{seuil}}$  pour différents combustibles, hypothèses simplificatrices et des burnups de déchargement de 49.8 GWj.t<sub>ML</sub><sup>-1</sup> (i.e. cycles de 350 jepp).

Combustible	$k_{\text{seuil},0}$	$\tilde{k}_{\text{seuil},0}$	$\delta k_{\text{seuil}}$	$\tilde{k}_{\text{seuil},650}$
UOx : 4.01%	1.022	1.047	25	0.995
MOX1 : 6.38%	1.024	1.030	6	1.004
MOX2 : 7.68%	1.024	1.027	3	1.004
MOX3* : 11.12%	1.023	1.023	0	1.004
MOX4* : 8.72%	1.023	1.025	2	1.003



Tableau 7.3  $\tilde{k}_{\text{seuil}}$  pour différents combustibles pour des burnups de déchargement de 45.5 GWj.t<sub>ML</sub><sup>-1</sup> (i.e. cycles de 320 jepp).

Combustible	$\tilde{k}_{\text{seuil},0}$	$\tilde{k}_{\text{seuil},650}$
UOx : 3.69%	1.046	0.994
MOX1 : 5.82%	1.030	1.004
MOX2 : 7.02%	1.027	1.004
MOX3* : 10.33%	1.023	1.004
MOX4* : 7.96%	1.025	1.003

Tableau 7.4  $\tilde{k}_{\text{seuil}}$  pour différents combustibles pour des burnups de déchargement de 55.4 GWj.t<sub>ML</sub><sup>-1</sup> (i.e. cycles de 390 jepp).

Combustible	$\tilde{k}_{\text{seuil},0}$	$\tilde{k}_{\text{seuil},650}$
UOx : 4.54%	1.053	1.001
MOX1 : 7.29%	1.033	1.007
MOX2 : 8.76%	1.029	1.006
MOX3* : 12.38%	1.025	1.006
MOX4* : 9.97%	1.027	1.005

La lecture des résultats du tableau 7.2 fournit plusieurs enseignements. Premièrement, dans le cas non simplifié la valeur de  $k_{\text{seuil}}$  s'avère assez incroyablement constante et ce quelle que soit la nature du combustible ou sa qualité isotopique.

Deuxièmement, l'hypothèse simplificatrice visant à substituer la prise en compte du burnup de chaque assemblage par un calcul par lot en supposant une irradiation constante génère peu d'erreur dans le cas du MOx avec moins de 6 mk d'écart entre les deux situations mais nettement plus pour l'UOx avec une déviation de 25 mk. De plus, cette simplification a pour conséquence de disperser les valeurs en fonction de la nature et la qualité du combustible. Les valeurs de référence sont comprises entre 1.022 et 1.024 alors que les valeurs issues du calcul plus grossier sont comprises entre 1.023 et 1.047 soit un dispersement 12 fois plus important. Dans la suite (section 7.3), les écarts induits sur les inventaires isotopiques par la modification de la valeur  $k_{\text{seuil}}$  dans les réseaux de neurones de CLASS sont étudiés. Notons que la valeur usuellement utilisée dans CLASS [5], à savoir  $k_{\text{seuil}}^0 = 1.039$ , correspond bien à la moyenne des  $\tilde{k}_{\text{seuil},0}$ . Elle s'avère un peu trop élevée pour les MOx et trop faible pour l'UOx. Cette valeur correspond relativement bien à une base de données de calcul de réseau générés à bore nul mais absolument pas à des calculs de réseau avec une concentration de bore significative où l'on devrait employer une valeur de 1.00 environ sauf si l'on désire volontairement induire une surestimation de l'enrichissement.

En prenant en compte les pénalités liées à l'ajout d'une quantité constante de bore dans le calcul de réseau, les valeurs sont nettement abaissées, ce qui était attendu, et les écarts entre les combustibles se réduisent à nouveau. Ce qui nous ramène quasiment à la dispersion du calcul non simplifié.

## 7.2 Précision des PMC pour le calcul d'enrichissement

Dans cette section la précision des PMC pour le calcul d'enrichissement est évaluée. Pour ce faire, les sources d'erreurs autre que la méthode d'interpolation des réseaux sont éliminées via l'utilisation de la valeur de  $\tilde{k}_{\text{seuil}}$  déterminée pour chacun des cas testés. Le procédé consiste à fournir au réseau de neurones chargé de la prédiction de la réactivité une valeur d'enrichissement et un vecteur isotopique. L'enrichissement est ensuite modifié par dichotomie jusqu'à ce que la cible de burnup soit atteinte.

Tableau 7.5 Enrichissements calculés par DONJON5 et les PMC avec la valeur de  $\tilde{k}_{\text{seuil}}$  déterminée dans les tableaux 7.2, 7.3 et 7.4 ainsi que l'écart relatif entre ces valeurs pour divers combustibles et burnups cibles. Les enrichissements sont exprimées en pourcentage d'uranium 235 ou du vecteur plutonium parmi les métaux lourds et les écarts entre enrichissements en pourcentages relativement à la valeur de référence

Combustible	BU (GWj.t <sub>ML</sub> <sup>-1</sup> )	$\varepsilon_{\text{DONJON5}}$ (% <sub>ML</sub> )	$\varepsilon_{\text{CLASS}}$ (% <sub>ML</sub> )	$\Delta\varepsilon$ (% relatifs)
UOx	45.5	3.69	3.70	+0.3
UOx	49.8	4.01	4.01	+0.0
UOx	55.4	4.54	4.53	-0.2
MOX1	45.5	5.82	5.90	+1.4
MOX1	49.8	6.38	6.43	+0.8
MOX1	55.4	7.29	7.31	+0.3
MOX2	45.5	7.02	6.97	-0.7
MOX2	49.8	7.68	7.62	-0.8
MOX2	55.4	8.76	8.65	-1.3
MOX3*	45.5	10.33	9.60	-7.1
MOX3*	49.8	11.12	10.44	-6.1
MOX3*	55.4	12.38	11.79	-4.8
MOX4*	45.5	7.96	7.86	-1.3
MOX4*	49.8	8.72	8.82	+1.2
MOX4*	55.4	9.97	10.11	+1.4

Les résultats présentés dans le tableau 7.5 sont univoques. Avec la valeur de  $\tilde{k}_{\text{seuil}}$  correspondant exactement à celle calculée via DONJON5, l'enrichissement prédit par les PMC dévie de celui calculé par DONJON5 de moins de 1.4 % relatif excepté dans le cas MOX3\*. Pour ce calcul particulier, la prédiction de l'enrichissement est comprise entre 5 et 7 % relatifs ce qui est très mauvais. Une explication peut être que MOX3 est situé aux limites de la base de

données d'entraînement. Or, les réseaux de neurones sont connus pour effectuer des prédictions qui se dégradent proche des bords du domaine d'apprentissage. Dans le cas UOx, les résultats sont encore meilleurs que pour les MOx en général avec des déviations inférieures à 0.3 % relatifs. Sur la figure 7.2 sont représentés les écarts entre les réactivités prédites par les réseaux de neurones et la réactivité calculée directement avec DRAGON5 pour les combustibles MOX1, MOX2, MOX3\* et MOX4\* et des burnups de déchargement de  $49.8 \text{ GWj.t}_{\text{ML}}^{-1}$ . L'écart initial est plus important en raison d'une difficulté des réseaux à prédire la chute de réactivité liée à l'apparition du xénon 135 et du samarium 149 (de l'ordre de 2500 pcm au total). Cet écart initial n'est pas problématique puisque c'est le  $\tilde{k}_{\text{seuil}}$  qui détermine le burnup accessible et, in fine, l'enrichissement. Or, le premier point considéré dans le calcul du  $\tilde{k}_{\text{seuil}}$  correspond à des temps de l'ordre de 300 jours soit au moment où la réactivité prédite est revenue proche de celle du calcul de référence. Après disparition des effets temporaires liés au xénon et au samarium, les écarts entre les prédictions des PMC et le calcul DRAGON5 restent limités à moins de 500 pcm pour l'ensemble des combustibles. Dans le cas MOX3\*, les biais d'entraînement induisent une très mauvaise simulation pour les 200 premiers jours d'irradiation. Si le calcul de  $\tilde{k}_{\text{seuil}}$  est effectué sur les résultats des PMC cela aboutit aux valeurs de 1.0480, 1.0308, 1.0275, 1.0233 et 1.0255 soit les valeurs initiales répertoriées dans le tableau 7.2 compte tenu de la précision utilisée (1 mk). Une très grande reproductibilité des réseaux sur le  $\tilde{k}_{\text{seuil}}$  est donc observée, et ce quelle que soit l'isotopie considérée. A contrario, il est difficile de trouver une explication simple à l'évolution des écarts entre les prédictions des réseaux de neurones et le calcul DONJON5 avec la nature du combustible. On peut supposer qu'il s'agit d'une erreur statistique, l'erreur induite par les réseaux de neurones (tout autre paramètre identique par ailleurs) étant probablement régit par une distribution gaussienne centrée en 0.

Le tableau 7.5 est donc une quantification des biais induits par le modèle issu de la propagation des incertitudes des réseaux sur le calcul d'enrichissement. Il démontre que le choix d'une valeur de  $\tilde{k}_{\text{seuil}}$  adapté en fonction du burnup cible et de la composition initiale du combustible, permet une prédiction des enrichissements à mieux que 1.5 % (relatifs) pour des combustibles qui ne sont pas proches des limites du domaine considéré, avec les modèles classiquement utilisés dans CLASS. Malheureusement, dans CLASS le  $\tilde{k}_{\text{seuil}}$  est une donnée fixe pour un réacteur quelle que soit la composition initiale. Il est donc nécessaire de quantifier l'erreur globale du calcul de l'enrichissement en propageant cette incertitude dans le scénario.

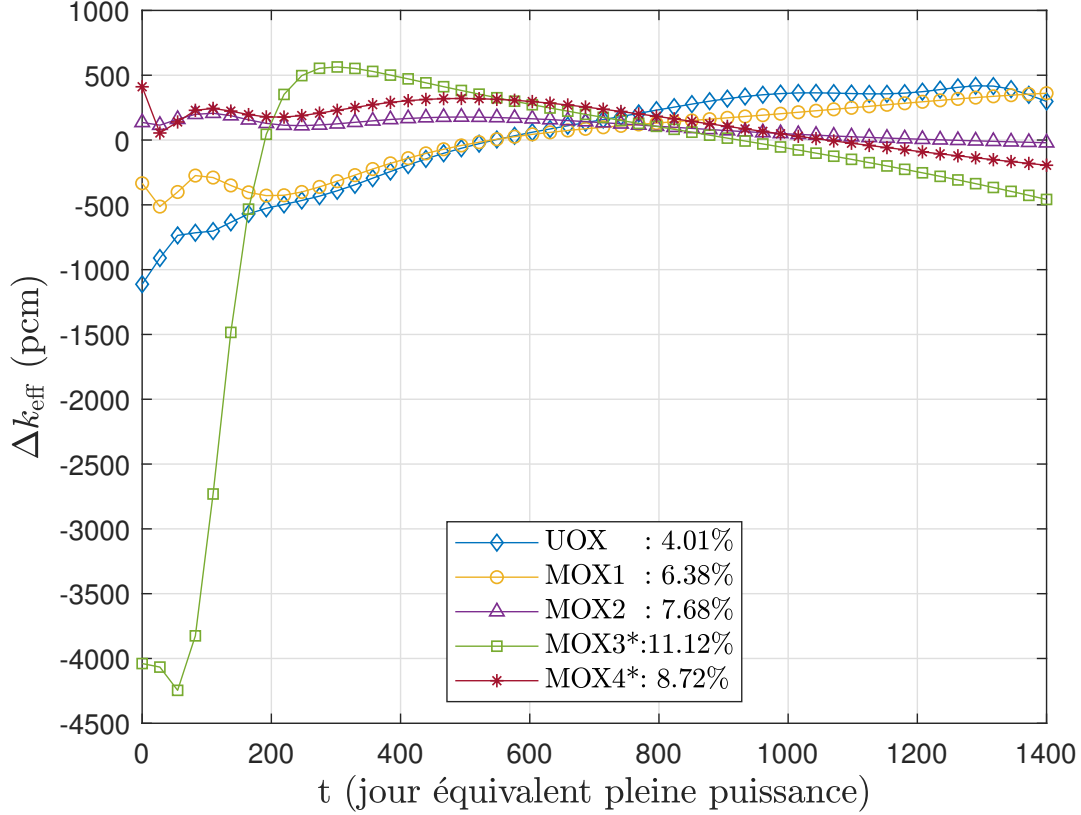


Figure 7.2 Écarts entre les réactivités prédites par les PMC et DRAGON5 pour différents combustibles pour des burnups de déchargement de  $49.8 \text{ GWj.t}_{\text{ML}}^{-1}$  (i.e. des temps cycles de 350 jours équivalents pleine puissance)

### 7.3 Écart sur les enrichissements prédits par les PMC en raison de l'incertitude sur le $\tilde{k}_{\text{seuil}}$ .

Dans cette section l'impact sur les prédictions d'enrichissement lié à l'imprécision sur le  $\tilde{k}_{\text{seuil}}$  est évalué. En effet, dans CLASS, une seule valeur de  $\tilde{k}_{\text{seuil}}$  est inscrite dans le jeu de données pour chaque type de combustible. Or, cela a été détaillé dans les tableaux 7.2, 7.3 et 7.4, cette valeur change dans des proportions significatives en fonction de la cible de burnup et de l'isotopie du combustible.

Tableau 7.6 Enrichissements calculés par les réseaux de neurones avec les valeurs de  $\tilde{k}_{\text{seuil}}$  de référence déterminées dans les tableaux 7.2, 7.3 et 7.4 et les valeurs arbitraires de 1.040 et 1.050 ainsi que l'écart relatif entre ces valeurs pour divers combustibles et burnups cibles. Les enrichissements sont exprimés en pourcentage d'uranium 235 parmi les métaux lourds et les écarts entre enrichissements en pourcentages relativement à la valeur de référence.

Combustible	BU (GWj.t <sub>ML</sub> <sup>-1</sup> )	$\varepsilon_{\text{ref}}$	$\varepsilon_{1.040}$	$\Delta\varepsilon_{\text{ref},1040}$	$\varepsilon_{1.050}$	$\Delta\varepsilon_{\text{ref},1050}$
UOx	45.5	3.69	3.61	-2.2	3.75	+1.6
UOx	49.8	4.01	3.92	-2.2	4.06	+1.2
UOx	55.4	4.53	4.32	-4.6	4.48	-1.1

Tableau 7.7 Enrichissements calculés par les réseaux de neurones avec les valeurs de  $\tilde{k}_{\text{seuil}}$  de référence déterminées dans les tableaux 7.2, 7.3 et 7.4 et les valeurs arbitraires de 1.020 et 1.030 ainsi que l'écart relatif entre ces valeurs pour divers combustibles et burnups cibles. Les enrichissements sont exprimés en pourcentage du vecteur plutonium parmi les métaux lourds et les écarts entre enrichissements en pourcentages relativement à la valeur de référence.

Combustible	BU (GWj.t <sub>ML</sub> <sup>-1</sup> )	$\varepsilon_{\text{ref}}$	$\varepsilon_{1.020}$	$\Delta\varepsilon_{\text{ref},1020}$	$\varepsilon_{1.030}$	$\Delta\varepsilon_{\text{ref},1030}$
MOX1	45.5	5.70	5.49	-3.7	5.70	+0.0
MOX1	49.8	6.33	5.97	-5.7	6.33	+0.0
MOX1	55.4	7.20	6.64	-7.8	7.15	-0.7
MOX2	45.5	6.57	6.54	-0.5	7.16	+8.2
MOX2	49.8	7.32	7.19	-1.8	7.82	+6.8
MOX2	55.4	8.32	8.03	-3.5	8.73	+4.9
MOX3*	45.5	9.70	9.28	-4.3	10.39	+7.1
MOX3*	49.8	10.45	10.10	-3.3	11.26	+7.8
MOX3*	55.4	11.57	11.20	-3.2	12.40	+7.2
MOX4*	45.5	7.45	7.64	+2.6	8.38	+12.5
MOX4*	49.8	8.32	8.44	+1.5	9.22	+10.8
MOX4*	55.4	9.44	9.52	+0.9	10.37	+9.9

Le tableau 7.7 présente les résultats obtenus par différents combustibles MOx avec des cibles de burnups de 45.5, 49.8 et 55.4 GWj.t<sub>ML</sub><sup>-1</sup>. Les valeurs de  $\tilde{k}_{\text{seuil}}$  qui ont été utilisées correspondent aux bornes minimales et maximales mesurées pour le combustible MOx arrondies à 10 mk près. Ainsi, la première valeur testée  $\tilde{k}_{\text{seuil}}=1.020$  s'avère inférieure au  $\tilde{k}_{\text{seuil}}$  effectivement mesuré pour chacun de ces combustibles et la seconde valeur  $\tilde{k}_{\text{seuil}}=1.030$  s'avère

supérieure excepté dans le cas du combustible MOX1 déchargé à  $55.4 \text{ GWj.t}_{\text{ML}}^{-1}$ . La précision du calcul de l'enrichissement par les modèles utilisant les réseaux de neurones est nettement dégradée. En effet, comparativement à la valeur de référence (calculée avec le  $\tilde{k}_{\text{seuil}}$  exact de chaque combustible) différant elle même de moins de 3% avec les calculs de cœur, les résultats obtenus avec ces constantes semi-arbitraires mènent à des écarts de -8 à +12.5 % relatifs dans les cas MOx et de -5 à +2 % dans les cas UOx. Notons que pour les MOx, la valeur de 1.020 n'assure pas une minoration des enrichissements, ce qui est plutôt inattendu. De plus, observons que si l'écart à la référence est inférieur pour chacun des cas testés avec la valeur de 1.020 avec un maximum de 8 % contre 12.5 % avec la valeur de 1.030, la dispersion des valeurs s'avère comparable dans les deux situations. Le paragraphe précédent a montré que les algorithmes utilisés pour prédire l'enrichissement sont très précis si le  $\tilde{k}_{\text{seuil}}$  est choisi adéquatement. Considérer une valeur moyenne et constante pour ce  $\tilde{k}_{\text{seuil}}$  comme dans les algorithmes actuels de CLASS dégrade considérablement la précision du calcul de l'enrichissement initial et induit des erreurs supérieures à 10 % pour cette grandeur.

#### 7.4 Écart entre les inventaires prédits par les PMC et DONJON5 au déchargement avec chargements identiques.

Dans cette section les erreurs générées par les réseaux de neurones dans la prédiction des inventaires isotopiques sont évaluées. Notons que ces erreurs sont dues d'une part aux erreurs numériques des réseaux, mais également à deux hypothèses majeures des PMC : la prise en compte d'un nombre limité de réactions  $(n,f)$ ,  $(n,\gamma)$  et  $(n,2n)$  elle-mêmes, s'appuyant sur un nombre limité d'isotopes.

Le tableau 7.8 présente les écarts relatifs sur les inventaires isotopiques déchargés entre les PMC et DONJON5 pour les principaux actinides et actinides mineurs présents dans le combustible MOx. Le calcul DONJON5 est pris comme référence. Pour déterminer les écarts, la prédiction des PMC pour le cœur réel doit être reconstituée. En effet, dans CLASS un cœur entièrement neuf qui évolue pendant quatre cycles est simulé ce qui est très différent du calcul DONJON5 dans lequel le cœur contient après chaque rechargement 40 assemblages neufs, 40 assemblages ayant effectué un cycle, 40 assemblages ayant effectué deux cycles et 37 assemblages ayant effectué trois cycles. Pour cela, à chaque instant  $t$ , la moyenne pondérée des inventaires prédits par les PMC après  $t$ ,  $t + 350$ ,  $t + 700$  et  $t + 1050$  jours équivalents pleine puissance est calculée.

Tableau 7.8 Écarts relatifs sur les inventaires déchargés entre des calculs effectués avec les PMC et avec DONJON5 dans les cas UOx et MOX1, 2, 3\* et 4\*.

(a) isotopes de l'uranium et du plutonium.

Combustible	$^{235}\text{U}$	$^{238}\text{U}$	$^{238}\text{Pu}$	$^{239}\text{Pu}$	$^{240}\text{Pu}$	$^{241}\text{Pu}$	$^{242}\text{Pu}$
UOx : 4.01%	-11.0	-0.2	13.9	0.7	-1.1	4.5	10.5
MOX1 : 6.38%	-5.7	-0.3	-0.3	-1.1	-2.4	0.5	1.1
MOX2 : 7.68%	-5.6	-0.3	-0.2	-2.0	-1.5	0.3	0.7
MOX3* :11.12%	-4.6	-0.3	-0.2	-1.3	-2.3	1.9	0.8
MOX4* : 8.72%	-1.7	-0.0	1.4	-19.2	1.2	-0.4	0.5

(b) isotopes de l'américium et du curium.

Combustible	$^{241}\text{Am}$	$^{242m}\text{Am}$	$^{243}\text{Am}$	$^{243}\text{Cm}$	$^{244}\text{Cm}$	$^{245}\text{Cm}$
UOx : 4.01%	-2.2	-0.3	19.0	15.4	28.1	34.5
MOX1 : 6.38%	-5.6	11.9	5.6	7.1	13.3	20.6
MOX2 : 7.68%	-7.0	-4.9	4.5	8.4	12.3	19.2
MOX3* :11.12%	-3.8	-6.4	3.9	12.1	12.9	18.7
MOX4* : 8.72%	2.3	15.7	-0.6	-2.7	-1.8	0.6

Dans ce tableau, on relève que les écarts mesurés sont nettement plus élevés dans le cas UOx que dans le MOx. La précision sur l'inventaire en uranium 235 est en particulier très mauvaise. Dans le combustible MOx la précision sur les inventaires de cet isotope est présentée mais n'a pas vraiment d'impact puisque le combustible contient de l'uranium appauvri à 0.25 % en plus du plutonium. Quelle que soit la nature du combustible, les différents isotopes du plutonium sont simulés avec des erreurs de quelques pour-cent au maximum. Le cas de l'erreur considérable mesurée pour le plutonium 239 dans le combustible MOX4\* peut probablement s'expliquer par le fait que ce combustible est aux frontières du domaine étudié (concernant le poids du plutonium 239 dans le vecteur plutonium). Notons que, bien que l'enrichissement soit déterminé avec une précision dégradée pour le combustible MOX3\*, lui aux frontières du domaine d'étude pour les plutonium 240 et 241, aucune déviation particulière n'est observée sur ces isotopes. Dans tous les cas, la simulation des actinides mineurs s'avère particulièrement mauvaise avec des écarts de l'ordre de 10 à 30 %. Néanmoins, un écart négatif sur l'américium 241 est toujours constaté tandis qu'un biais positif est en général observé sur les autres isotopes. Il devrait en résulter une déviation globale forte, mais atténuée sur l'inventaire total en actinides mineurs.

De plus, dans DONJON5 l'énergie thermique totale est calculée comme la somme des énergies dégagées par les fissions et les captures radiatives là où, dans les modèles fondés sur les réseaux de neurones, seule les réactions de fission sont génératrices d'énergie. En fait, à chaque réaction de fission est associée l'énergie de cette dernière à laquelle est ajoutée l'énergie des réactions autres que la fission (pondérée par une évaluation statistique du nombre de ces réactions rapporté au nombre de fissions sur le cycle). Dans la modélisation ici retenue, seule l'énergie des fissions proprement dites a été retenue. Considérant que l'énergie moyenne associée à une capture radiative est de l'ordre de 5 MeV, que l'énergie moyenne associée à une réaction de fission est de l'ordre de 200 MeV et qu'il y a environ 1.2 réaction de capture radiative par réaction de fission [15], le calcul de l'énergie totale via les fissions uniquement crée un biais qui peut être estimé à 3 % sur le nombre de fissions, le flux et donc sur les inventaires d'atomes fissiles. Ce biais est effectivement mesuré, un défaut de masse sur les inventaires en produits de fission déchargés de l'ordre de 150 à 200 kg soit 4 % est constaté.

Pour résumer, les différentes approximations et biais de modélisation générés par l'utilisation des PMC plutôt que le calcul de cœur dans CLASS sont :

- L'incertitude sur la valeur  $\tilde{k}_{\text{seuil}}$  liée d'une part au fait de considérer un rythme de combustion moyen à tout instant et d'autre part au fait de considérer un poids équivalent pour chacun des lots. Ces approximations provoquent des écarts très variables de l'ordre de 10 % sur l'UOx (où  $\delta k_{\text{seuil}}=2.5$  mk) et 5 % pour le MOx (pour lesquels  $\delta k_{\text{seuil}}$  est de l'ordre de 0 à 6 mk).
- La définition d'un  $\tilde{k}_{\text{seuil}}$  unique pour toute une catégorie de combustible, par exemple, le combustible MOx quelle que soit sa composition isotopique générant des erreurs de l'ordre de 10 % sur les inventaires chargés.
- La précision des PMC sur l'enrichissement (avec la valeur exacte de  $\tilde{k}_{\text{seuil}}$  fournie) à l'origine d'une erreur de moins de 2 % sur les chargements.
- La précision des PMC pour le calcul des inventaires (avec les valeurs exactes de  $\tilde{k}_{\text{seuil}}$  et d'enrichissement fournies) provoquant des biais variables selon les isotopes et en général limités à moins de 5 % mais pouvant atteindre 10 % pour l'uranium 235 dans l'UOX et 15 à 30 % sur certains actinides mineurs.

## 7.5 Écart entre le calcul couplé CLASS-DONJON5 et le calcul CLASS-PMC sur des scénarios élémentaires

Après avoir quantifié la précision numérique des réseaux de neurones et évalué leur sensibilité vis à vis de chacun des paramètres pris comme des données du problème il nous reste à constater l'impact de la modélisation par les réseaux de neurones à l'échelle du cycle compa-



rativement à un calcul de cœur avec DONJON5 à cette même échelle. Pour cela, des calculs de scénarios dit élémentaires correspondant à la situation représentée sur la figure 7.3 sont d'abord effectués.



Figure 7.3 Schéma représentatif d'un scénario élémentaire dans CLASS impliquant un seul réacteur.

Le procédé consiste à simuler un chargement unique de réacteur avec l'étape de fabrication préliminaire au chargement du combustible et l'étape post irradiation de refroidissement en piscine afin de quantifier les compensations d'erreurs possibles entre le calcul de l'enrichissement et de l'irradiation. Ce calcul est effectué dans CLASS avec d'une part le modèle utilisant les PMC et d'autre part celui faisant intervenir les calculs DONJON5 couplés à l'exécution du code de scénario. Les éléments qui diffèrent entre ces deux calculs sont le modèle d'irradiation et le modèle d'équivalence décrits dans le chapitre 2 : la modélisation DONJON5 sera considérée comme la modélisation de référence et comparée à la modélisation classique de CLASS basée sur les PMC. L'étude est menée pour les cas UOx et MOx. Des cas correspondant uniquement à la base de données MULTICOMPO dont les bornes ont été définies via des hypothèses relativement restrictives sont considérés. Les scénarios élémentaires simulent donc des chargements uniques de réacteurs 100 % UOx ou MOx en considérant un temps de fabrication de deux années. En s'appuyant sur les résultats présentés aux tableaux 7.6 et 7.7, les valeurs de 1.045 et 1.025 pour les  $\tilde{k}_{\text{seuil}}$  UOx et MOx respectivement sont retenues pour les calculs faisant intervenir les réseaux de neurones. Ces valeurs semi arbitraires, correspondent aux valeurs de  $\tilde{k}_{\text{seuil}}$  pour des burnups de déchargement de  $49.8 \text{ GWj.t}_{\text{ML}}^{-1}$  arrondies à 5 mk près.

Le tableau 7.9 recense les écarts par famille d'éléments chimiques après déchargement des réacteurs et après refroidissement. Les figures 7.4, 7.5 et 7.6 présentent, quant à elles, les écarts par isotope au moment du chargement des réacteurs (soit l'impact du modèle d'équivalence), au moment du déchargement des réacteurs (soit l'impact cumulé du modèle d'équivalence et du modèle d'irradiation), après cinq années de refroidissement à l'entrée dans les stocks ainsi que l'écart relatif au moment du déchargement.

Tableau 7.9 Écart relatif (%) sur les inventaires au déchargement et dans les stocks (après refroidissement) entre le calcul CLASS-PMC et le calcul couplé CLASS-DONJON5 sur un scénario élémentaire.

	Uranium (hors $^{238}\text{U}$ )		Plutonium		Actinides Mineurs	
Cas	Déchargement	Stocks	Déchargement	Stocks	Déchargement	Stocks
UOx	-12.2	-12.0	+1.7	+2.9	+25.3	+14.2
MOx	-0.7	-0.1	-3.3	-2.7	+3.7	+1.3

Ces tableaux et figures fournissent divers enseignements :

- Les écarts mesurés dans le cadre des scénarios élémentaires sont cohérents avec ceux déterminés pour les différents éléments de la simulation indépendamment (modèle d'équivalence , modèle d'irradiation, etc.)
- L'écart est particulièrement important concernant la consommation de l'uranium 235 dans le cas UOx (de l'ordre de 12 %).
- L'écart sur les quantités produites (UOx) ou résiduelles (MOx) de plutonium reste limité à moins de 3.5 %. Notons que les écarts sont à peu près identiques en proportion et de signes inverses. A l'échelle du scénario, une compensation d'erreur importante est attendue.
- L'écart sur les prédictions pour l'ensemble des actinides mineurs est très important dans l'UOx, de l'ordre de 15 à 25 % alors qu'il est plus modéré dans le MOx de l'ordre de 1 à 4 %.
- Les écarts par famille chimiques sont plus modérés en raison de compensation d'erreurs entre les isotopes. C'est notamment le cas du plutonium dans le MOx et des actinides mineurs dans l'UOx.

Les observations qui peuvent être tirées des figures 7.4, 7.5 et 7.6 requièrent des explications supplémentaires. La forte décroissance de l'erreur constatée entre les inventaires d'américium et curium prédits par le calcul CLASS-PMC vis à vis du calcul CLASS-DONJON5 s'explique par un simple effet de dilution. L'écart massique reste constant, mais l'inventaire total en américium croît fortement pendant les cinq années de refroidissement de par la désintégration du plutonium 241. Dans le cas UOx, cette désintégration conduit à un doublement de l'inventaire total en américium et curium (ce qui divise l'erreur relative du même facteur), dans le cas MOx, cette désintégration conduit à une augmentation de 50 % de l'inventaire et donc à une diminution d'un tiers environ de l'erreur relative.

L'évolution des écarts constatés pour les différents isotopes du plutonium demande une discussion plus détaillée, car la dilution liée à la disparition d'environ 20 % du plutonium 241

pendant le refroidissement ne change l'inventaire total en plutonium que de 3%. Il s'agit cette fois d'un biais de modélisation. Rappelons que dans les bases de données pour DONJON5 certains isotopes n'ont pas été pris en compte afin de limiter les temps d'exécution et la taille de la MULTICOMPO. C'est notamment le cas des uranium 237, neptunium 238, neptunium 239 et curium 242. Ces isotopes ont été négligés de par leur faible proportion parmi les actinides en cœur et leur faible durée de vie. Dans le calcul CLASS-PMC ils sont pris en compte ce qui, après que ces stocks temporaires se soient désintégrés, augmente nettement les inventaires massiques de plusieurs isotopes du plutonium. L'évolution des écarts particulièrement importants sur les inventaires en plutonium 238 et plutonium 239 visibles sur la figure 7.5 s'explique par la désintégration des stocks de curium 242 et neptunium 239. En effet, la désintégration du curium 242 représente un apport de 2 kg dans l'UOx et 20 kg dans le MOx pour le plutonium 238. D'autre part, la désintégration du neptunium 239 représente un apport de 7.5 kg dans l'UOx et 5.5 kg dans le MOx pour le plutonium 239. De même, l'évolution des écarts sur les inventaires en neptunium 237 s'explique par la désintégration de l'uranium 237 vers cet isotope à raison de 1 kg de matière dans l'UOx et 200 g dans le MOx. Citons également la contribution des désintégrations du neptunium 238 augmentant également l'inventaire en plutonium 238 de quelques dizaines de grammes. La somme de ces contributions représente moins de 10 kg au total dans l'UOx et 30 kg dans le MOx. Ceci est très faible devant les inventaires déchargés de l'ordre de 72.2 t mais s'avère en proportion important dans certains cas comme celui du plutonium 238 dont l'inventaire total au déchargement n'est que de l'ordre de 20 kg dans l'UOx et 200 kg dans le MOx.

Enfin, d'autres écarts évoluent via des effets rétroactifs. Par exemple, l'évolution des écarts observés sur l'américium 241 entre le déchargement et les stocks est un effet secondaire de l'écart sur les inventaires en plutonium 241 déchargés. Dans l'UOx, les PMC prédisent 6 kg de plutonium 241 en surplus, dans le MOx, ils sous-estiment cette quantité de 23 kg. Le plutonium 241 se désintégrant à hauteur de 20 % pendant le refroidissement, ceci conduit à un surplus de 1.2 kg d'américium 241 après refroidissement dans le cas UOx et à un déficit de 4.6 kg dans le MOx. De même, la surprédiction du curium 244, qui se désintègre sur le plutonium 240 à raison de 17.5 % pendant le refroidissement fait évoluer les stocks de cet isotope de 500 g dans l'UOx et de 1.5 kg dans le MOx.

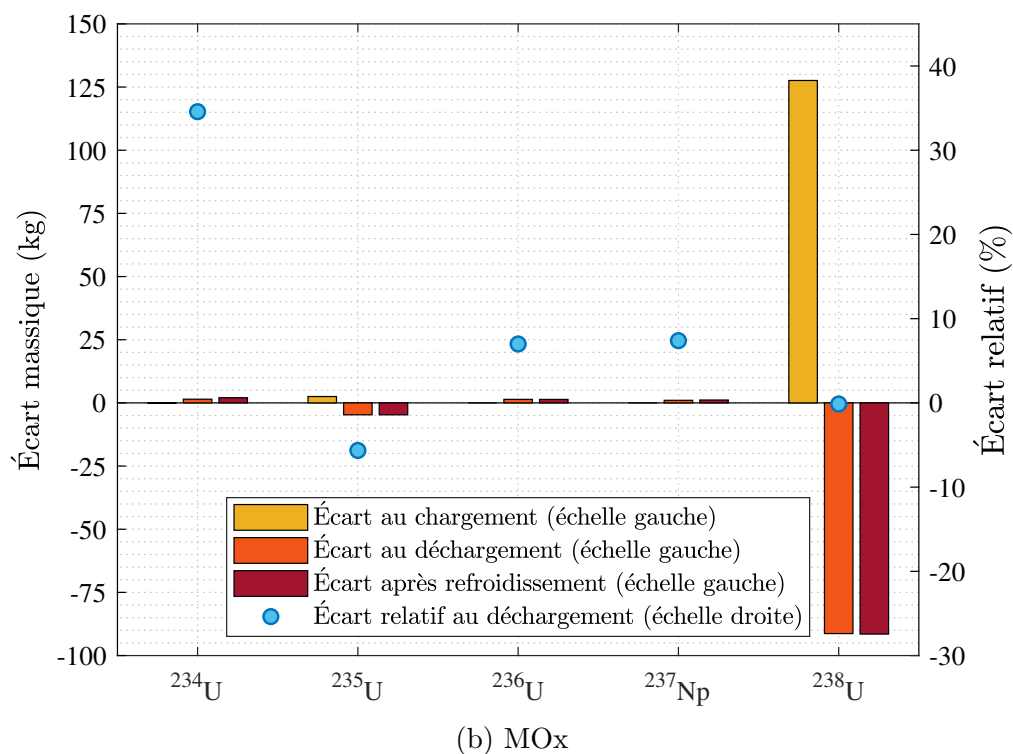
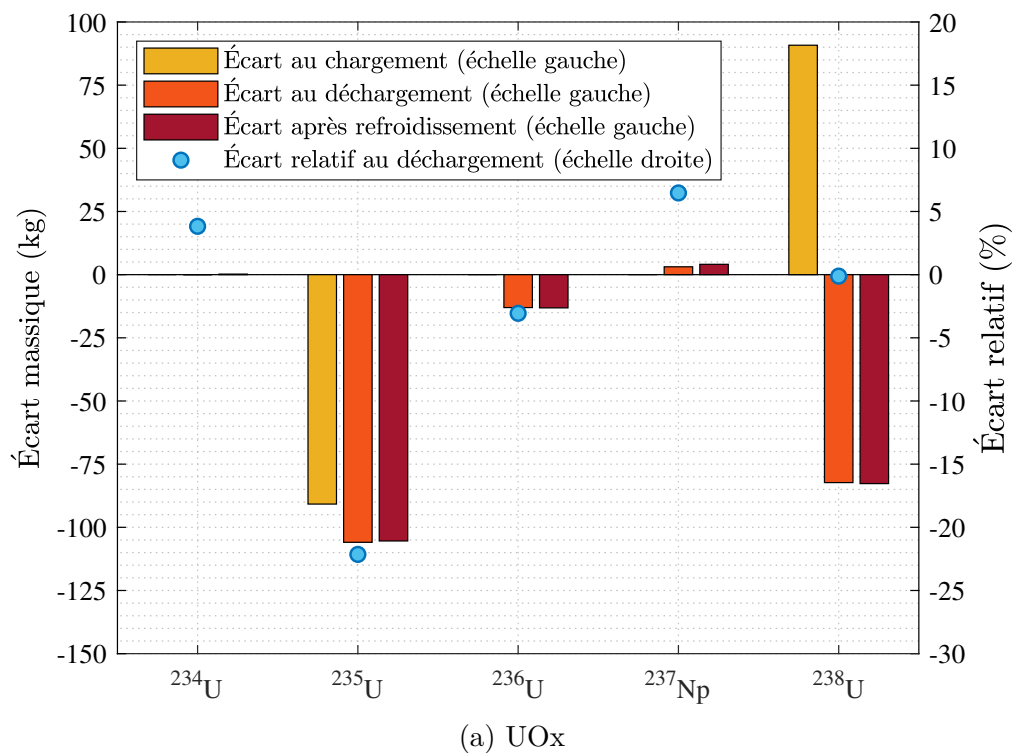


Figure 7.4 Écart sur les inventaires à différents instants du scénario élémentaire pour les isotopes de l'uranium et du neptunium.

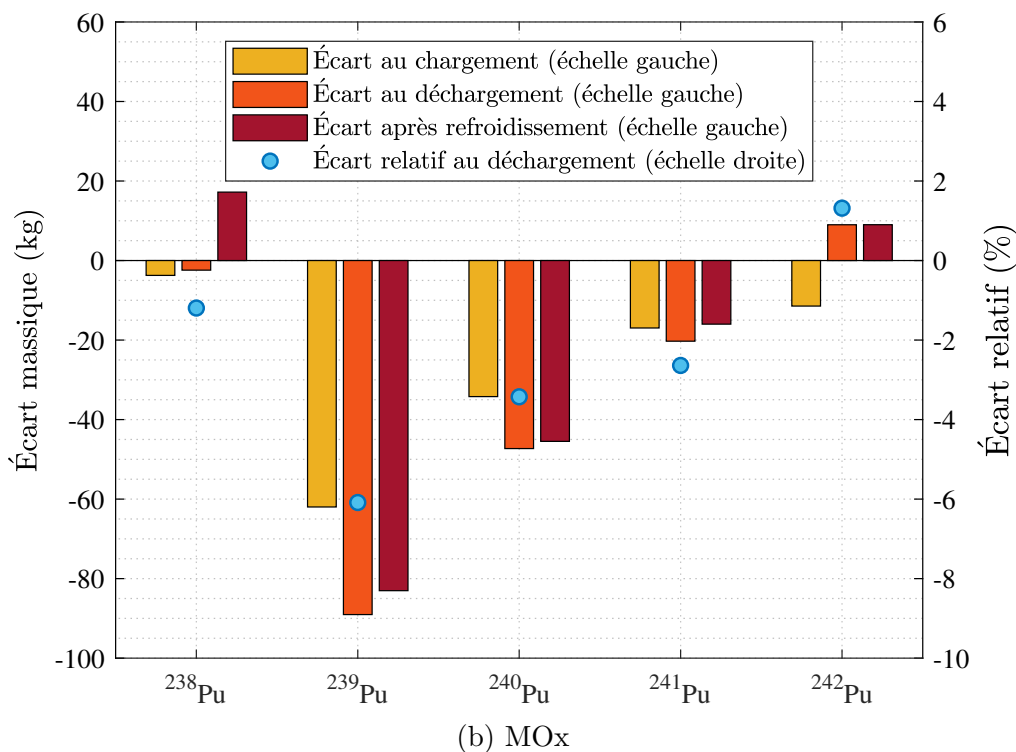
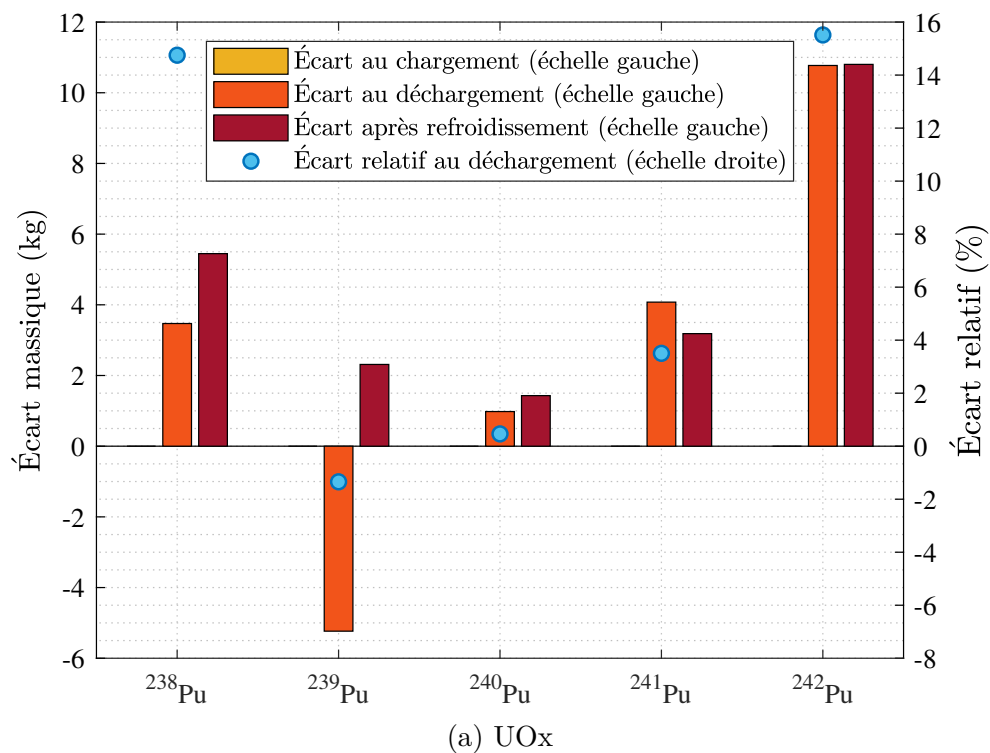


Figure 7.5 Écart sur les inventaires à différents instants du scénario élémentaire pour les isotopes du plutonium.

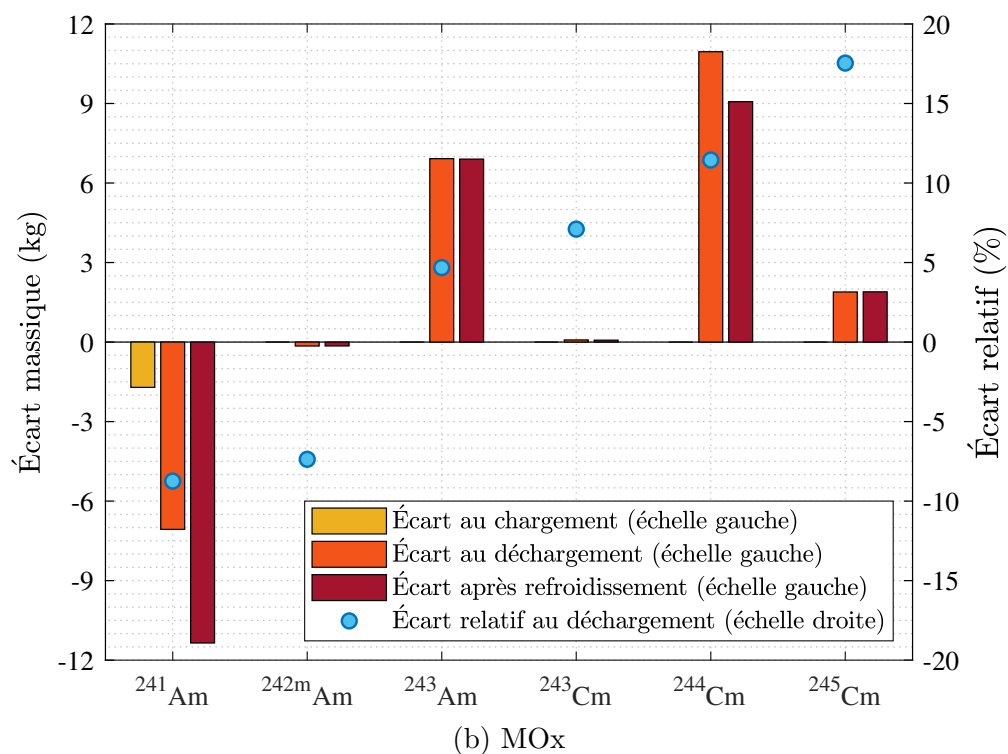
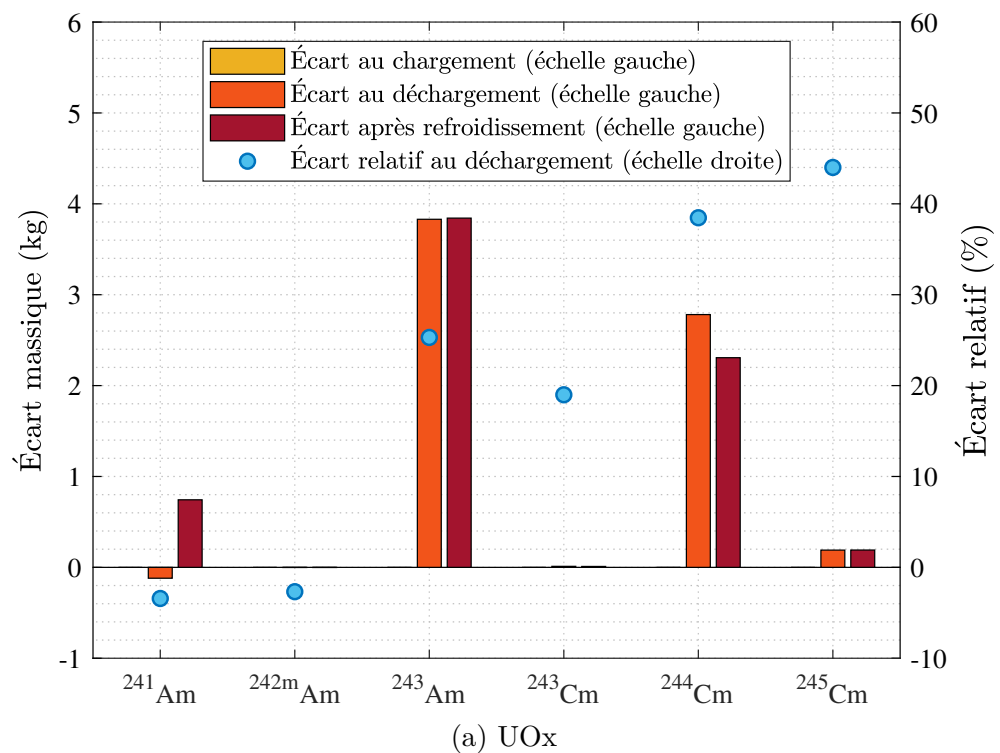


Figure 7.6 Écart sur les inventaires à différents instants du scénario élémentaire pour les isotopes de l'américium et du curium.

## 7.6 Écart entre le calcul couplé CLASS-DONJON5, le calcul CLASS-PMC et des calculs hybrides sur des scénarios complexes

Dans cette section l'impact de la modélisation via les PMC vis-à-vis du calcul couplé entre CLASS et DONJON5 est quantifié dans le cadre d'un scénario complexe. Par scénario complexe est entendu un scénario dans lequel plusieurs réacteurs en interaction sont simulés. En l'espèce, le plutonium du combustible déchargé d'une flotte de réacteurs UOx est, après refroidissement, utilisé comme ressource fissile pour la fabrication de combustible MOx d'un autre réacteur. Afin de considérer des cas où suffisamment de ressource est disponible à chaque chargement, neuf réacteurs sont alimentés en combustible UOx et un unique réacteur en combustible MOx. Le réacteur MOx est démarré environ 20 ans après la flotte de réacteurs UOx (permettant à trois déchargements complets d'avoir terminé leur période de refroidissement en piscine). Des durées de vie de 60 ans pour les réacteurs UOx et 40 ans pour le réacteur MOx sont arbitrairement retenues. La figure 7.7 est une représentation schématique des différents éléments en interaction dans le cadre de ce scénario.

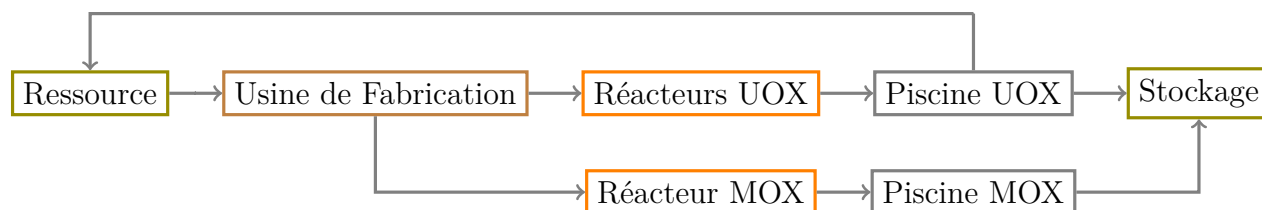


Figure 7.7 Schéma représentatif d'un scénario complexe dans CLASS impliquant des réacteurs UOX et un réacteur MOX.

Dans cette section CLASS-DONJON5 désigne la situation dans laquelle tous les réacteurs (UOX et MOx) sont modélisés par des appels à des calculs de cœur DONJON5 pour le modèle d'équivalence et pour le modèle d'irradiation. Sont nommés CLASS-PMC les scénarios dans lesquels les réacteurs sont modélisés entièrement via des PMC. Enfin, sont nommés CLASS-Hybride les scénarios dans lesquels des calculs de cœurs sont effectués pour les réacteurs UOX et des PMC sont utilisés pour les réacteurs MOx. Cette dernière modélisation, quoiqu'originale, est proposée compte tenu des écarts constatés précédemment sur les éléments constitutifs des modèles de réacteurs dans CLASS. En effet, les déviations observées étant particulièrement fortes pour les modèles UOX et plus modérées dans les modèles MOx et compte tenu du gain considérable en temps d'exécution, il apparaît intéressant d'explorer cette option. Afin d'alléger certains graphiques, les trois options ne sont pas nécessairement représentées.

Des cas correspondants à la base de données MULTICOMPO uniquement sont étudiés. Les

scénarios complexes simulent des réacteurs 100 % UOx ou MOx en interaction en considérant un temps de fabrication de deux années pour le combustible. Le MOx est obtenu par mono recyclage de combustible UOx usagé après cinq années de refroidissement en piscine. Dans tous les cas un parc de dix réacteurs est considéré. Initialement dix réacteurs UOx sont opérés puis après un certain délai, la composition du parc est modifiée afin de comporter un réacteur MOx et neuf réacteurs UOx. Ce rapport de un pour neuf assure un approvisionnement suffisant du réacteur MOx à chaque instant comme cela a été développé dans la section 5.10. Enfin, deux méthodes de gestion des stocks sont considérées, la méthode LIFO et la méthode MIX (alternant LIFO et FIFO à chaque chargement). Le tableau 7.10 recense les caractéristiques différenciant les scénarios A à D ici étudiés et dont certains résultats sont présentés dans la suite de cette section.

Tableau 7.10 Caractéristiques des scénarios complexes de référence. Les dates de démarrages sont indiquées en années à partir du démarrage du scénario (année 0) et les burnups de déchargement en  $\text{GWj.t}_{ML}^{-1}$ .

	Réacteurs UOx		Réacteurs MOx		Gestion des stocks
Nomenclature	$t_{\text{démarrage}}$	$\text{BU}_{\text{déchargement}}$	$t_{\text{démarrage}}$	$\text{BU}_{\text{déchargement}}$	Nature
Scénario A	2.0	49.8	25.0	49.8	LIFO
Scénario B	2.0	49.8	25.0	49.8	MIX
Scénario C	2.0	45.5	19.5	55.4	LIFO
Scénario D	2.0	45.5	19.5	55.4	MIX

La construction de ces scénarios répond aux objectifs suivants :

- Scénario A : un scénario dans lequel les réacteurs UOx et MOx opèrent avec des burnups de déchargement identiques. Le réacteur MOx démarre 23 années après les réacteurs UOx et la gestion des stocks est de type LIFO. Compte tenu du rapport d'un pour huit entre le nombre de réacteurs alimentés en combustible MOx et UOx, et des temps de cycle de  $4 \times 350 \text{ jours} \simeq 4 \text{ ans}$ , ce scénario assure que le retraitement du dernier lot déchargé (et refroidi) est suffisant pour alimenter le prochain rechargement du réacteur MOx et que le démarrage du réacteur MOx s'effectue à un moment où la matière UOx recyclable est disponible (puisque  $23 > 4 + 5 + 2$ ). Ceci doit conduire à des situations de chargement et déchargement relativement stationnaires. Les écarts en fin de scénarios entre les différentes méthodes de calculs devraient donc être proportionnels à ceux observés dans les différentes phases du scénario.
- Scénario B : scénario identique au scénario A hormis en ce qui concerne la méthode de gestion des stocks cette fois de type MIX. Un effet relativement faible probable-



ment accentué pour les inventaires en actinides mineurs est attendu. En effet, cela revient à charger des combustibles MOx dans lesquels le plutonium 241 est plus dégradé. Or, les actinides mineurs sont formés via deux canaux principaux. Le premier est la désintégration du plutonium 241 et les captures successives sur le produit de cette désintégration, l'américium 241. Le second est la désintégration du plutonium 243 en américium 243. Un moindre chargement en plutonium 241 affecte les deux canaux puisqu'elle limite également la production de plutonium 242 et in fine celle du plutonium 243 (obtenu après deux réactions de capture neutronique successives).

- Scénario C : un scénario dans lequel le réacteur MOx démarre 17.5 années après les réacteurs UOx et une gestion des stocks LIFO. Ce scénario se différencie par des burnups de déchargements UOx nettement inférieurs à ceux du MOx. Après une mise à l'équilibre des premiers cycles, des chargements et déchargements assez stationnaires sont attendus dans les différentes phases du scénarios mais potentiellement très différents de ceux observés dans le scénario A.
- Scénario D : un scénario qui conserve les caractéristiques du scénario B hormis la gestion des stocks cette fois de type MIX qui introduit le même type de disparités avec le scénario C que celles précédemment détaillées entre les scénarios A et B.

Dans les sous-sections suivantes sont toujours présentés les graphiques correspondant aux résultats obtenus avec le calcul entièrement couplé dénommé CLASS-DONJON5 et le calcul faisant intervenir uniquement les réseaux de neurones noté CLASS-PMC. Des courbes représentatives du calcul hybride faisant intervenir des modèles DONJON5 pour les réacteurs UOx et des modèles PMC pour les réacteurs MOx, nommé CLASS-Hybride1, sont présentées dans certains cas, mais pas dans d'autres. Il en va de même pour les résultats correspondant au cas CLASS-Hybride2 pour lequel ce sont les réacteurs UOx qui font appel à des modèles PMC et les réacteurs MOx à des modèles DONJON5. L'ajout systématique des courbes correspondant à ces derniers aurait été superflu dans l'analyse par type de réacteur. En revanche, l'information sur les inventaires au niveau du cycle est intéressante puisqu'elle retranscrit l'erreur cumulée des différents calculs à l'échelle du scénario et est donc présentée. Le tableau 7.11 recense les modélisations adoptées pour chaque type de cœur ainsi que le  $\tilde{k}_{\text{seuil}}$  choisi dans le cas où les réseaux de neurones sont employés.

Tableau 7.11 Caractéristiques des modèles de réacteurs utilisés dans les scénarios.

Nomenclature	Modèle d'équivalence		Modèle d'irradiation		$\tilde{k}_{\text{seuil}}$	
	UOx	MOx	UOx	MOx	UOx	MOx
CLASS-DONJON5	DONJON5	DONJON5	DONJON5	DONJON5	-	-
CLASS-PMC	PMC	PMC	PMC	PMC	1.045	1.025
CLASS-Hybride1	DONJON5	PMC	DONJON5	PMC	-	1.025
CLASS-Hybride2	PMC	DONJON5	PMC	DONJON5	1.045	-

### 7.6.1 Scénario A.

Les figures 7.8, 7.9, 7.10, 7.11, 7.12 et 7.13 présentent les résultats obtenus dans le cadre du scénario A. Du point de vue de l'évolution individuelle des différents isotopes du plutonium dans les réacteurs, UOx comme MOx, les courbes montrent que les écarts entre le calcul couplé et la modélisation via les réseaux de neurones sont très faibles pour les isotopes principaux ( $^{239}\text{Pu}$ ,  $^{240}\text{Pu}$  et  $^{241}\text{Pu}$ ) tandis que pour les isotopes secondaires ( $^{238}\text{Pu}$  et  $^{242}\text{Pu}$ ), représentant moins de 15 % du plutonium total, ils sont significatifs. Gardons à l'esprit qu'il ne s'agit ici que des écarts au niveau de l'irradiation en cœur cumulant donc l'impact du modèle de chargement et du modèle d'irradiation, mais qu'il faudra également ajouter les effets fins liés aux désintégrations des stocks d'actinides mineurs détaillées dans la section 7.5. En détail, les résultats des figures 7.8, 7.9 et 7.12 montrent que le calcul avec les PMC surestime la quantité de plutonium générée dans les réacteurs UOx tout en sous estimant sa qualité de l'ordre de 1 %. Ce calcul sous-estime également la consommation du plutonium dans les réacteurs MOx avec une même tendance concernant la correcte modélisation des isotopes principaux, mais un biais significatif sur les quantités en fin d'irradiation pour les plutoniums 238 et 242. Notons que pour les réacteurs MOx l'inventaire au chargement est déjà biaisé par les écarts constatés sur les déchargements UOx. Ainsi, les écarts relatifs sur les différents isotopes du plutonium au chargement des réacteurs MOx ne sont pas égaux. L'impact cumulé de la déviation sur les combustibles UOx déchargés, le chargement MOx et l'irradiation dans les réacteurs MOx génère (voir figure 7.10) des écarts au chargement plus fort qu'au déchargement. Dans CLASS-PMC on charge plus de plutonium mais on le brûle à un rythme encore plus élevé que dans CLASS-DONJON5.

La représentation des contenus des stocks par type de réacteur de la figure 7.10 permet d'observer que le scénario A atteint effectivement son objectif à savoir que la quasi-totalité du plutonium déchargé après le cinquième cycle par les réacteurs UOx sert à alimenter le réacteur MOx. Le niveau d'équilibre des inventaires en plutonium présents dans les stocks

est situé autour de 26 tonnes dans les cas CLASS-DONJON5 comme CLASS-PMC mais un surplus de l'ordre de 500 kg est constaté pour le second comparativement au premier. La figure 7.11 illustre la rupture de pente dans le rythme d'accumulation du plutonium qui passe de 2 tonnes par an environ à 1.2 tonnes par an avec l'apparition du réacteur MOx.

À partir des résultats présentés à la figure 7.13, observons que contrairement à un constat industriellement connu, la quantité résiduelle d'uranium 235 déchargée est très faible (moins de 0.4 % de l'inventaire en métal lourd déchargé) et est même inférieure à l'abondance naturelle de cet isotope dans le minerai d'uranium. Ceci est dû au fait que les modèles de réacteurs ici considérés sont purement académiques et ne considèrent aucune marge de criticité. L'enrichissement est déterminé de manière à obtenir un cœur exactement critique à bore nul au moment du rechargement. Dans la réalité, pour des raisons de sûreté et de manoeuvrabilité, un certain nombre de dispositifs absorbants et de barres de contrôles restent insérés en cœurs ce qui nécessite un surplus d'enrichissement afin d'assurer la criticité à chaque instant. Ceci conduit à des déchargements en général plus riches en uranium 235 ce qui peut justifier un réenrichissement de l'uranium de retraitement afin de produire du combustible [39] mais n'est pas étudié ici. Contrairement aux observations effectuées pour le plutonium on constate que les écarts sur les inventaires déchargés sont plus importants que ceux sur les inventaires chargés. Ceci est cohérent avec la section 7.5 où il a été montré que les PMC surestiment la consommation de l'uranium 235 de l'ordre de 10 à 15 %. Ici, les PMC sous-estiment l'enrichissement et donc l'inventaire chargé mais ils surestiment également la disparition de l'uranium 235 ce qui aboutit à un écart vis-à-vis de DONJON5 plus fort au déchargement qu'au chargement.

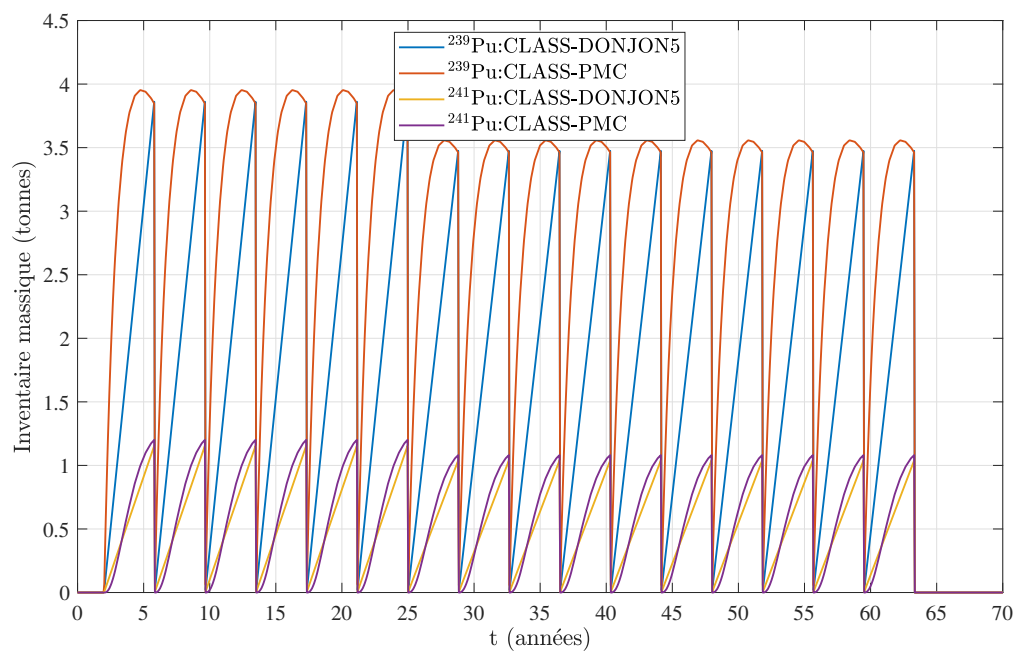
Le cumul au niveau du cycle pour les inventaires en plutonium et actinides mineurs est présenté à la figure 7.11. L'écart relevé sur la quantité totale de plutonium générée dans le scénario est limité à environ 2 tonnes pour un total de l'ordre de 90 tonnes. L'écart sur les quantités d'actinides mineurs est quant à lui de l'ordre de 1.5 tonnes pour un total de 19 tonnes environ ce qui est en proportion bien plus important. Pour le plutonium, le contenu des stocks UOx et MOx représentés à la figure 7.10 montre que cet écart est dû en égale proportion à la modélisation des réacteurs UOx et MOx pour environ une tonne chacun. Ces deux constats correspondent parfaitement aux observations effectuées pour les scénarios élémentaires et précédemment détaillées.

Sur les figures 7.11 et 7.12 on observe que les méthodes hybrides, dans le cadre de scénario, permettent des gains de précision tout à fait différents en fonction de la modélisation des réacteurs UOx ou MOx par les PMC ou par des calculs DONJON5. Sur le plutonium la méthode CLASS-Hybride1 (qui modélise les réacteurs UOx avec des calculs DONJON5 et

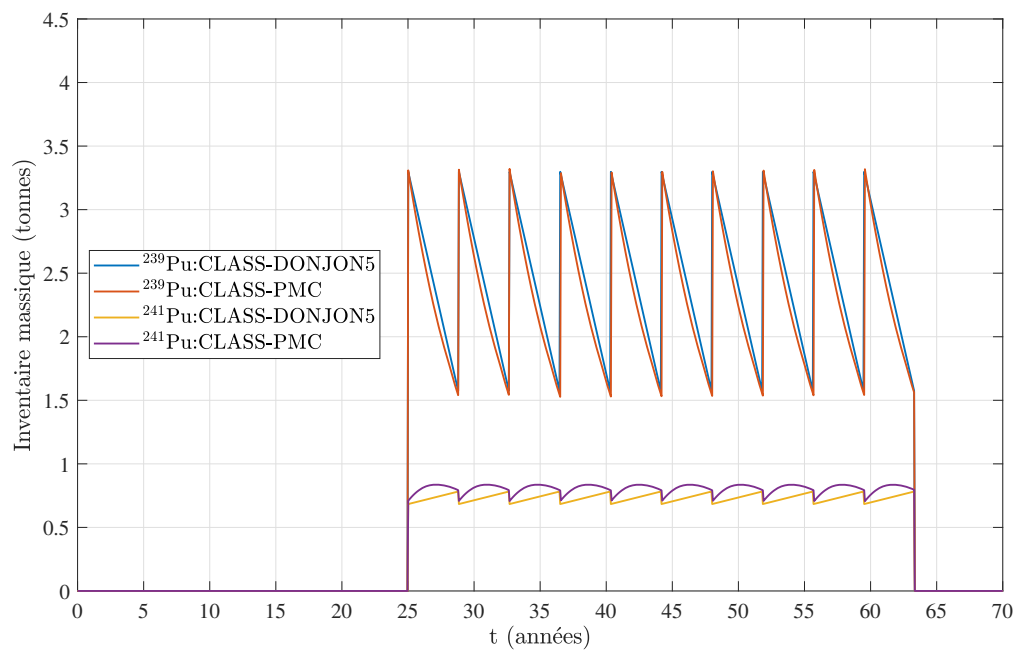
les MOx avec des PMC) permet de revenir à une erreur marginale vis à vis du calcul entièrement couplé, a contrario, la méthode CLASS-Hybride2 ne corrige que très faiblement les écarts précédemment observés. Ceci apparaît surprenant étant donné le constat précédent selon lequel l'écart provient environ pour moitié des réacteurs UOx et pour l'autre moitié du réacteur MOx. Pour mener une analyse cohérente des gains et pertes liés à l'utilisation des méthodes hybrides il faut regarder les écarts relatifs par familles chimiques. Ces écarts permettent plus facilement de déceler les compensations d'erreurs qui expliquent les contradictions comme celle qui vient d'être évoquée. C'est l'objet du tableau 7.12 qui recense ces déviations à la fin du scénario A, entre le calcul couplé, le calcul entièrement porté par les PMC et les méthodes hybrides. Concernant les actinides mineurs, le calcul CLASS-Hybride1 corrige une grande partie de l'erreur ce qui est plutôt logique puisque ce sont dans les réacteurs UOx que les écarts constatés sur les inventaires en actinides mineurs sont les plus forts, et, bien que ces éléments soient produits en moindre proportion dans les réacteurs UOx que dans les réacteurs MOx (voir section 5.10) le ratio de 1 pour 9 dans le nombre d'unités opérées implique une production totale équitablement répartie d'actinides mineurs dans les réacteurs UOx et MOx. Pour la famille du plutonium on constate que l'essentiel de l'erreur provient du réacteur MOx et le calcul CLASS-Hybride2 permet d'y remédier quasi entièrement.

Tableau 7.12 Écart relatif (%) sur les inventaires après 70 années pour le scénario A.

Cas	Plutonium	Actinides Mineurs
CLASS-DONJON5	référence	référence
CLASS-PMC	+3.1	+6.0
CLASS-Hybride1	+0.1	+1.3
CLASS-Hybride2	+3.3	+5.1

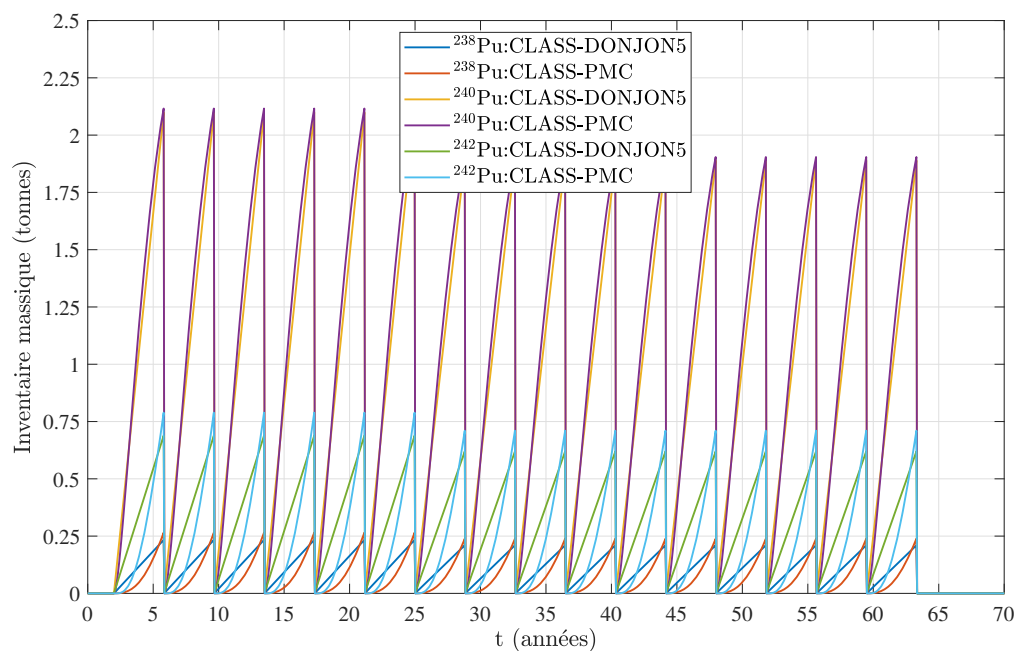


(a) Réacteurs UOx

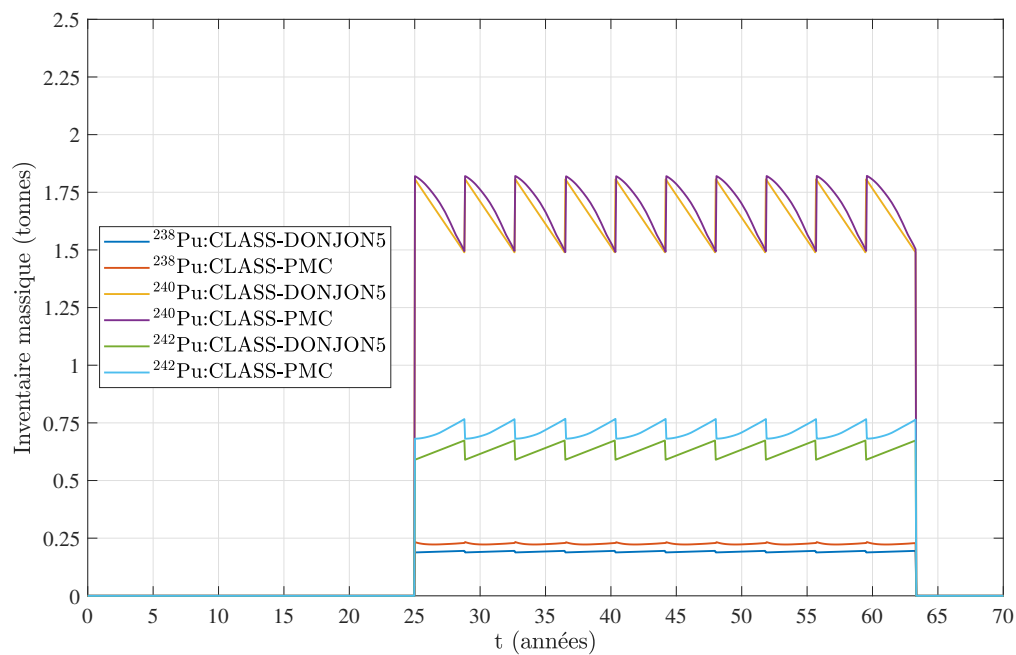


(b) Réacteurs MOx

Figure 7.8 Évolution des inventaires massiques en  $^{239}\text{Pu}$  et  $^{241}\text{Pu}$  dans les différents réacteurs (scénario A).

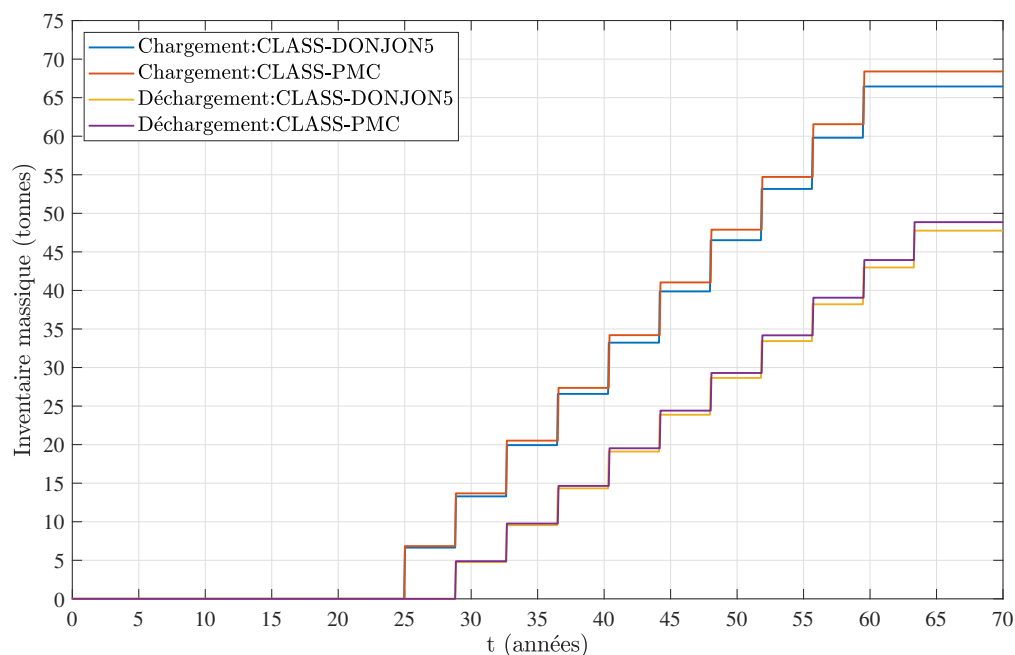


(a) Réacteurs UOx

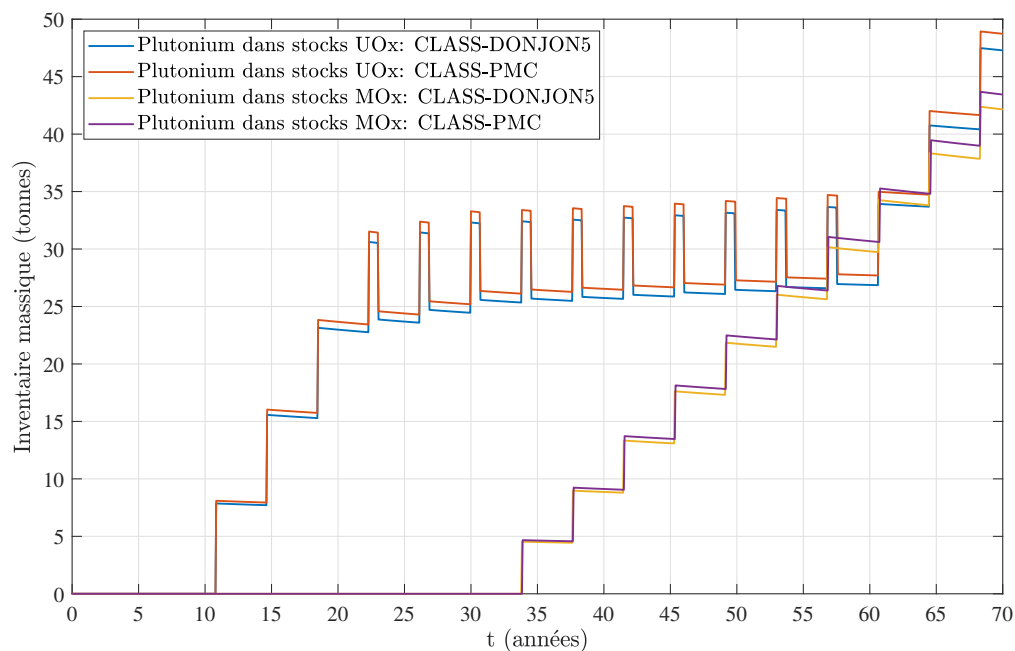


(b) Réacteurs MOx

Figure 7.9 Évolution des inventaires massiques en  $^{238}\text{Pu}$ ,  $^{240}\text{Pu}$  et  $^{242}\text{Pu}$  dans les différents réacteurs (scénario A).

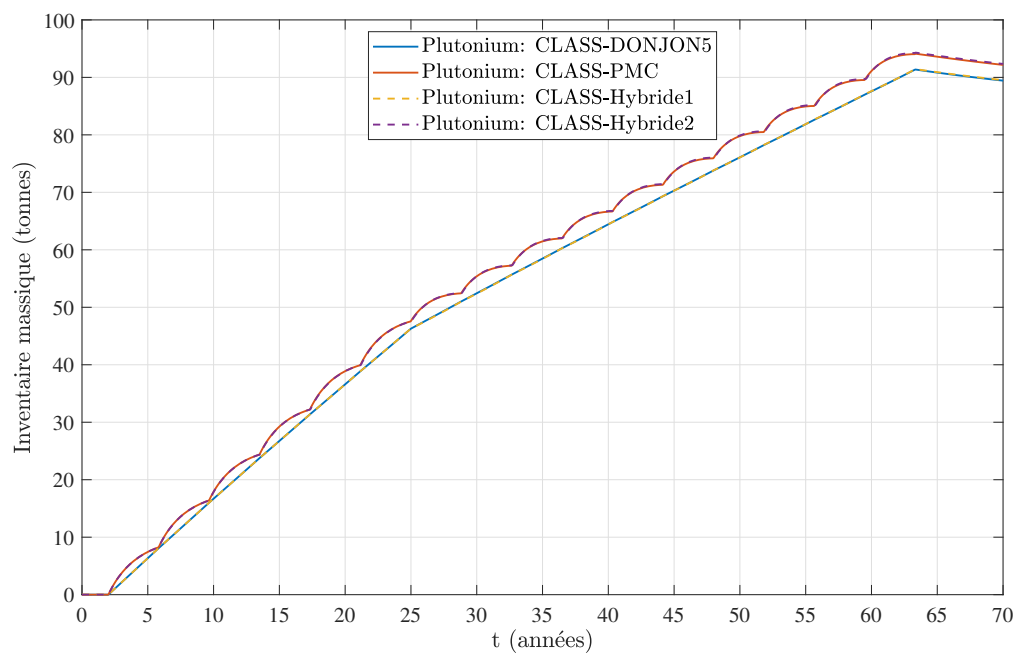


(a) Chargements et déchargements cumulés en plutonium dans les réacteurs MOx

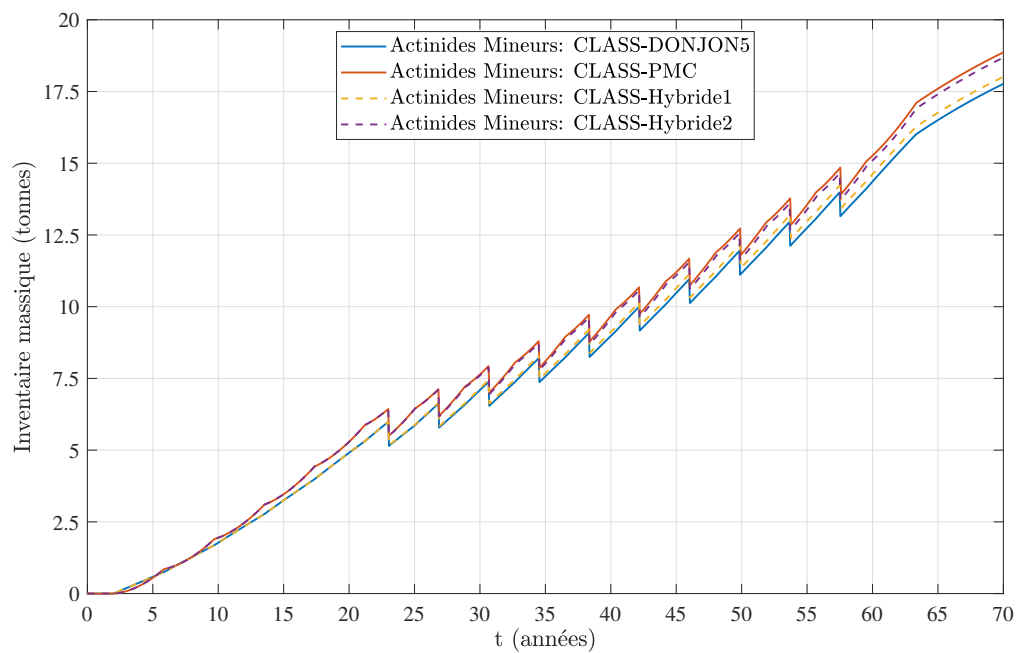


(b) Inventaires massiques en plutonium présents dans les stocks UOx et MOx

Figure 7.10 Inventaires cumulés chargés et déchargés dans les réacteurs MOx et présents dans les stocks UOx et MOx en plutonium (scénario A).



(a) Plutonium



(b) Actinides Mineurs

Figure 7.11 Inventaires massiques en plutonium et actinides mineurs au niveau du cycle (scénario A).



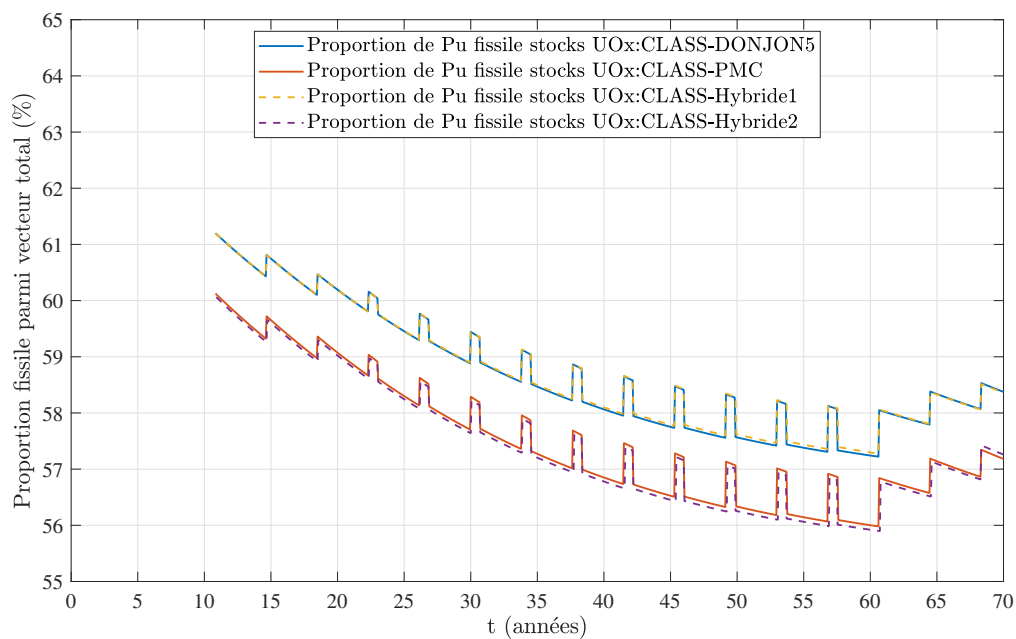


Figure 7.12 Qualité du plutonium disponible dans le combustible UOx déchargé et refroidi (scénario A)

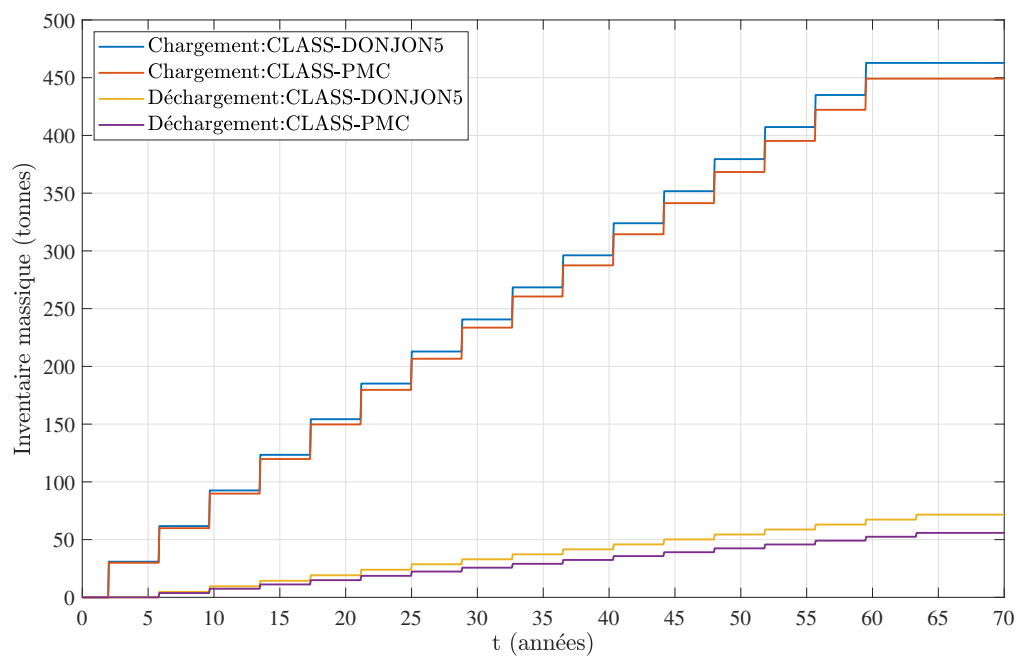


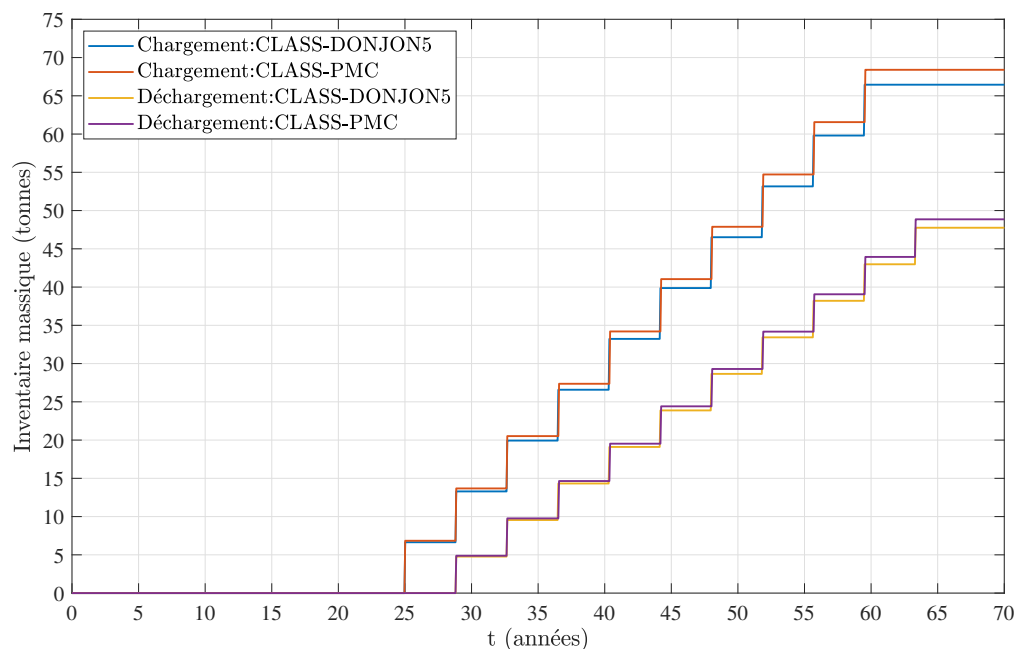
Figure 7.13 Inventaires cumulés chargés et déchargés en uranium 235 dans les réacteurs UOx (scénario A)

### 7.6.2 Scénario B.

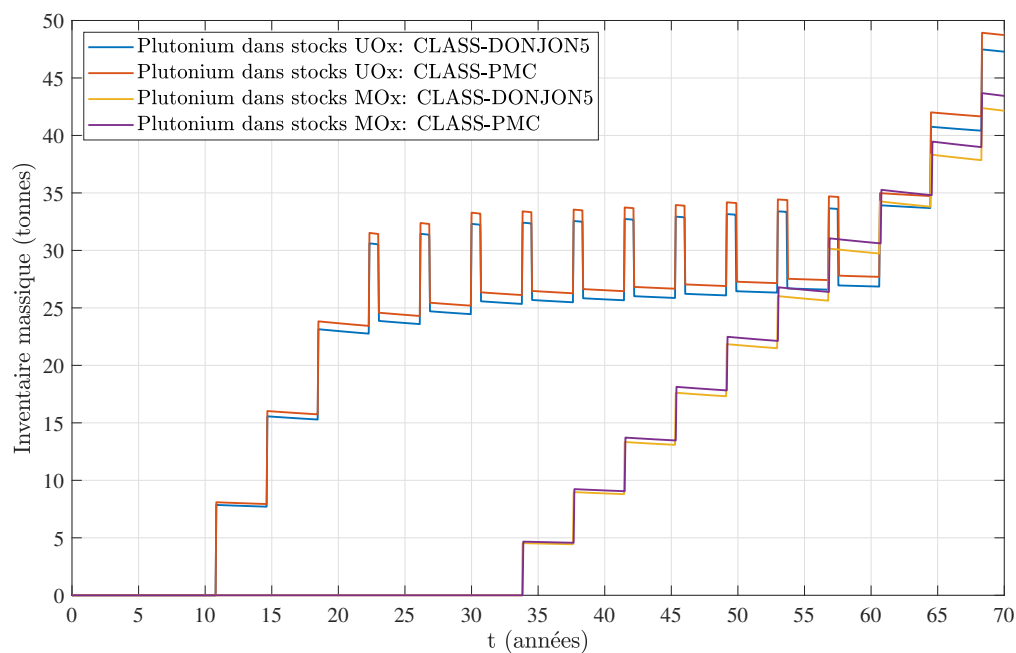
Comme cela a été évoqué précédemment le scénario B est identique au scénario A hormis pour ce qui concerne la méthode de gestion des stocks qui n'est plus du type LIFO mais du type MIX. Les figures 7.14 et 7.15 permettent d'observer que les résultats à l'échelle du cycle sont quasiment identiques à ceux du scénario A. Ceci est confirmé par les données du tableau 7.13 qui montre qu'il ne s'agit pas de compensations d'erreur, mais bien que les valeurs numériques sont rigoureusement identiques à celles déterminées au tableau 7.12

Tableau 7.13 Écart relatif (%) sur les inventaires après 70 années pour le scénario B.

Cas	Plutonium	Actinides Mineurs
CLASS-DONJON5	référence	référence
CLASS-PMC	+3.1	+6.0
CLASS-Hybride1	+0.1	+1.3
CLASS-Hybride2	+3.3	+5.1

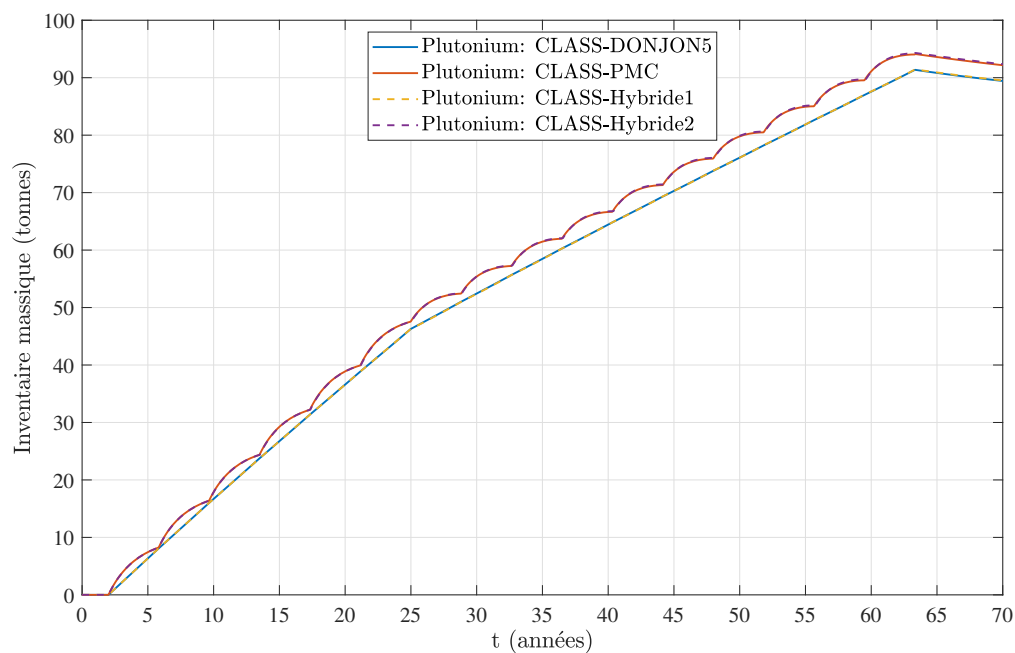


(a) Chargements et déchargements cumulés en plutonium dans les réacteurs MOx

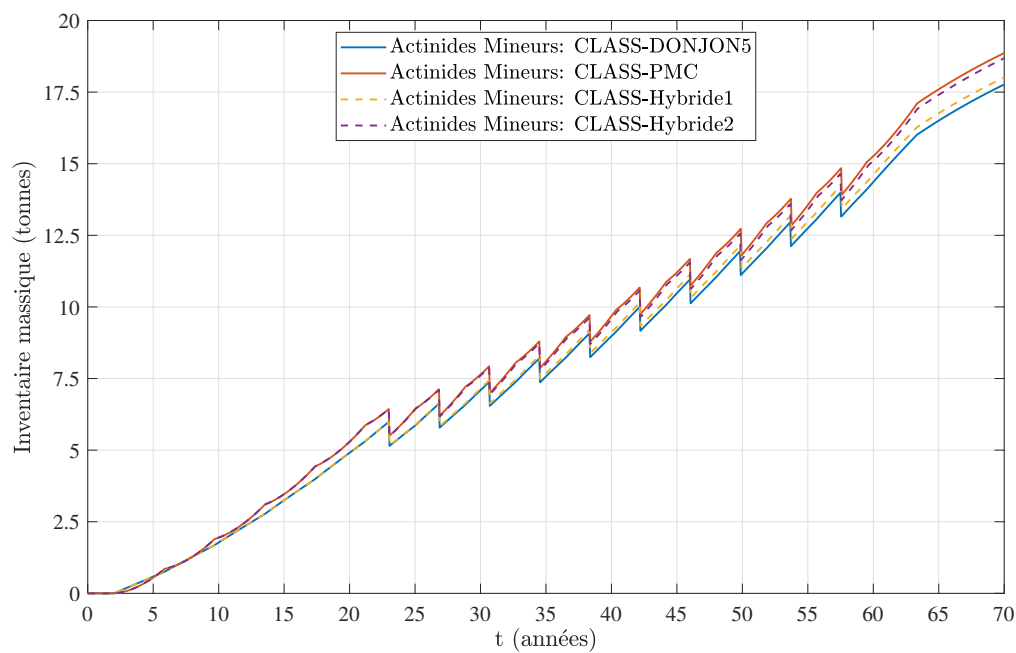


(b) Inventaires massiques en plutonium présents dans les stocks UOx et MOx

Figure 7.14 Inventaires cumulés chargés et déchargés dans les réacteurs MOx et présents dans les stocks UOx et MOx en plutonium (scénario B).



(a) Plutonium



(b) Actinides Mineurs

Figure 7.15 Inventaires massiques en plutonium et actinides mineurs au niveau du cycle (scénario B).

### 7.6.3 Scénario C.

Les figures 7.16, 7.17, 7.18, 7.19 et 7.20 présentent les résultats obtenus pour le scénario C. Un grand nombre de constats est partagé avec ceux effectués pour le scénario A c'est pourquoi ne seront décrits ci-après que les éléments différenciant les deux scénarios. Pour rappel ce scénario se caractérise par des burnups de déchargement plus faibles pour les UOx et plus importants pour les MOx.

Concernant l'évolution des isotopes du plutonium la simulation par les PMC présente des écarts significatifs avec les résultats du calcul couplé et ce y compris dans le cas des isotopes primordiaux que sont les plutoniums 239 et 240 (contrairement au scénario A). Sur les figures 7.16 et 7.17 il apparaît nettement qu'il s'agit d'un effet du modèle de chargement MOx. En effet, bien que l'évolution des isotopes du plutonium dans les réacteurs UOx apparaisse quasiment inchangée, et donc que la matière disponible pour le retraitement le soit elle aussi, des écarts sensibles au chargement des MOx sont constatés. Par contre, les déviations au déchargement des MOx sont inférieures à celles au chargement. Ceci est visible sur les graphiques de la figure 7.18 bien que les temps de cycles différents entre les UOx et MOx rendent difficile la lecture des résultats. La majorité de l'écart sur le plutonium dans le cycle provient d'un écart sur les inventaires massiques présents dans les stocks UOx qui est environ multiplié par un facteur sept tandis que l'écart sur les inventaires MOx est lui multiplié d'un facteur deux mais est cette fois négatif. Pour ce scénario, le réacteur MOx du calcul CLASS-PMC extrait considérablement moins de plutonium des stocks que celui du calcul CLASS-DONJON5. En fait, le calcul CLASS-PMC sous-estime grandement l'augmentation de l'enrichissement nécessaire pour passer de 49.8 à 55.4 GWj.t<sub>ML</sub><sup>-1</sup>. C'est ici l'impact majeur du choix de la valeur de  $\tilde{k}_{\text{seuil}}$  qui apparaît. En l'occurrence, celle-ci est nettement sous estimée (voir tableau 7.4). Notons que contrairement au scénario A, le déploiement du réacteur MOX ne conduit pas à une situation d'équilibre de l'inventaire en plutonium résiduel dans les stocks UOx. Ces constats permettent d'expliquer les résultats des graphiques de la figure 7.19 sur lesquels il est constaté que la modélisation CLASS-Hybride1 permet de compenser 75 % de l'écart entre le calcul couplé et le calcul avec les PMC et seulement 25 % dans le cas CLASS-Hybride2. Notons de manière peut être plus accessoire que la qualité de la ressource en plutonium présente dans les stocks et représentée sur la figure 7.19 est impactée par le nouveau burnup de déchargement des réacteurs UOx. Ceci permet d'augmenter la proportion en éléments fissiles de 1 % mais que l'écart entre le contenu des stocks issus du calcul CLASS-PMC et CLASS-DONJON est toujours identique et égal à 1 %.

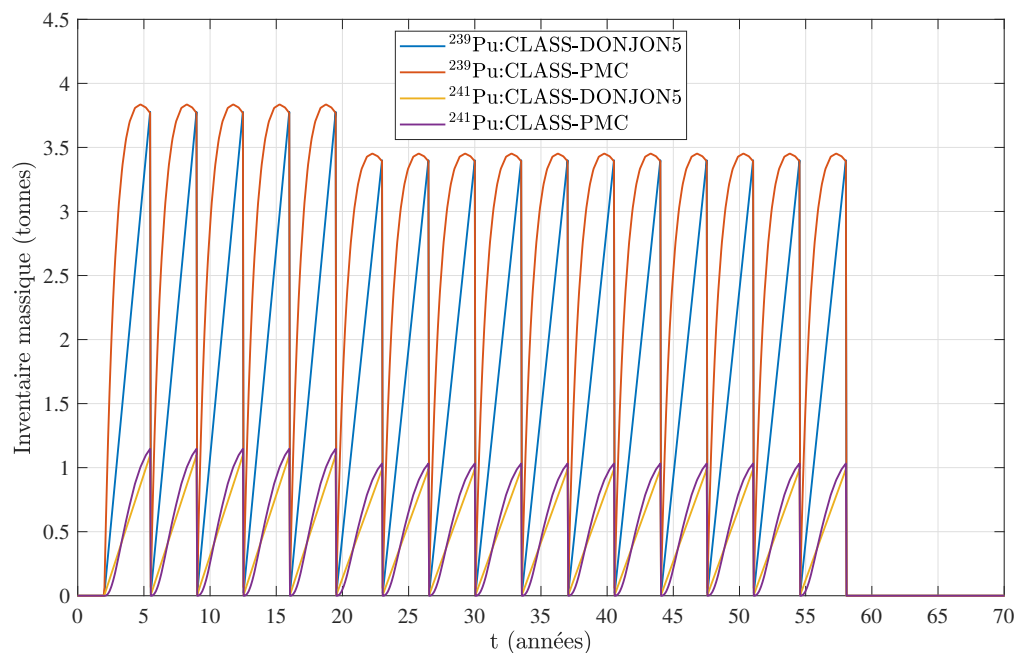
En ce qui concerne les actinides mineurs l'écart est plus important que dans le scénario A avec environ 2 tonnes d'écart pour un total de 18 tonnes et les modélisations hybrides ne

permettent de compenser qu'environ 50 % de l'erreur sur l'inventaire en actinides mineurs dans chaque cas. Ceci est simplement dû au fait que contrairement au scénario précédent, environ 50 % de l'écart sur les inventaires en actinides mineurs est généré par chacun des types de réacteurs. Le tableau 7.14 recensant les écarts en fin de scénario pour le scénario C par famille chimique permet de confirmer cette affirmation. La lecture de ce tableau confirme les constats déjà évoqués sur le poids respectif des modélisations des réacteurs UOx et MOx dans l'écart final.

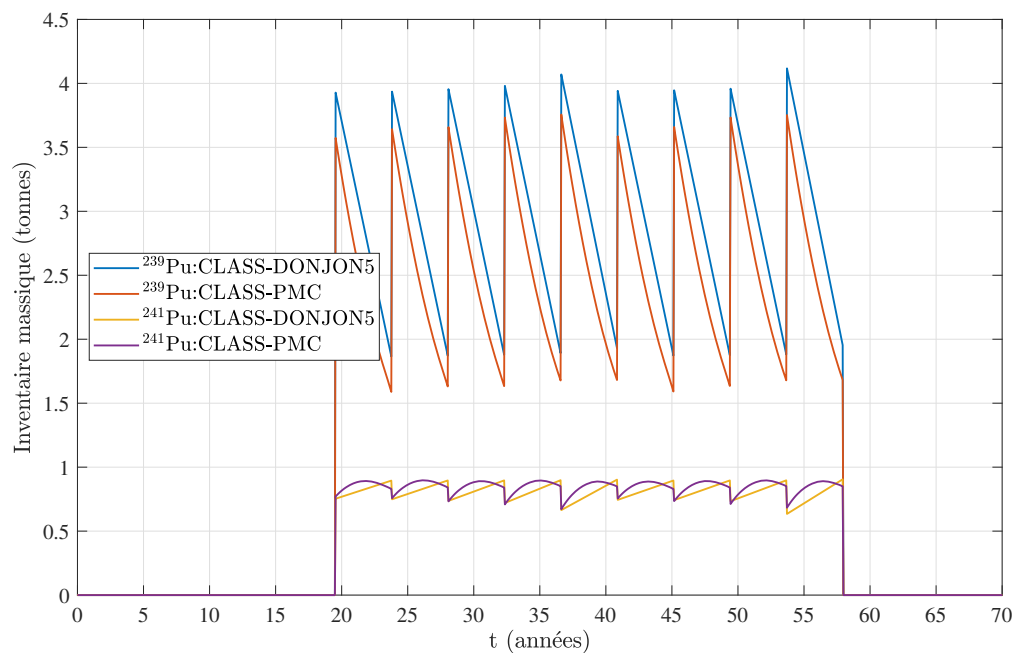
Concernant les écarts sur les chargement et déchargement d'uranium 235 dans les réacteurs UOx, la figure 7.21 montre que le calcul CLASS-PMC sous estime toujours les chargements comme les déchargements et que l'écart augmente avec l'irradiation. Le calcul CLASS-PMC surestime la consommation de l'uranium 235 pendant l'irradiation alors même que le chargement en uranium 235 par ce même calcul est déjà déficitaire vis-à-vis du calcul CLASS-DONJON5. Pour cet isotope, les effets de  $\tilde{k}_{\text{seuil}}$  sont moins visibles (alors que le burnup de déchargement est également significativement changé). Ceci s'explique par le fait que le  $\tilde{k}_{\text{seuil}}$  pour l'UOX est plus élevé et moins dispersé ( $\tilde{k}_{\text{seuil,UOx}} \in [1.45, 1.55]$ ) et donc, que la valeur arbitraire choisie de 1.045 crée moins d'erreur que dans le cas MOx ( $\tilde{k}_{\text{seuil,MOx}} \in [1.20, 1.35]$ ). De plus, la figure 7.22 montre que contrairement à ce qui est attendu, le fait d'adopter un modèle hybride ne permet pas de corriger l'écart sur l'uranium 235 (ni de l'uranium 236) présent dans le cycle. Dans cette étude, lors d'un retraitement, les isotopes qui ne sont ni de l'uranium 238 ni du plutonium sont envoyés dans les déchets et sortent du cycle. Ainsi, l'impact du modèle de chargement MOx impacte la quantité d'uranium 235 résiduelles dans le cycle via les quantités envoyées dans les déchets. En l'occurrence, le modèle de chargement du calcul CLASS-PMC sous-estime la quantité du plutonium à charger et donc la quantité de combustible utilisé à retraiter ce qui génère un surplus d'uranium 235 dans les stocks finaux comparativement au calcul CLASS-DONJON5. Notons que cet effet n'est visible que dans ce scénario pour lequel l'influence du  $\tilde{k}_{\text{seuil}}$  est forte (et parce que les quantités résiduelles d'uranium 235 sont très faibles) mais est présent dans toutes les études menées.

Tableau 7.14 Écart relatif (%) sur les inventaires après 70 années pour le scénario C.

Cas	Plutonium	Actinides Mineurs
CLASS-DONJON5	référence	référence
CLASS-PMC	+4.2	+10.1
CLASS-Hybride1	+1.1	+5.2
CLASS-Hybride2	+3.1	+4.2

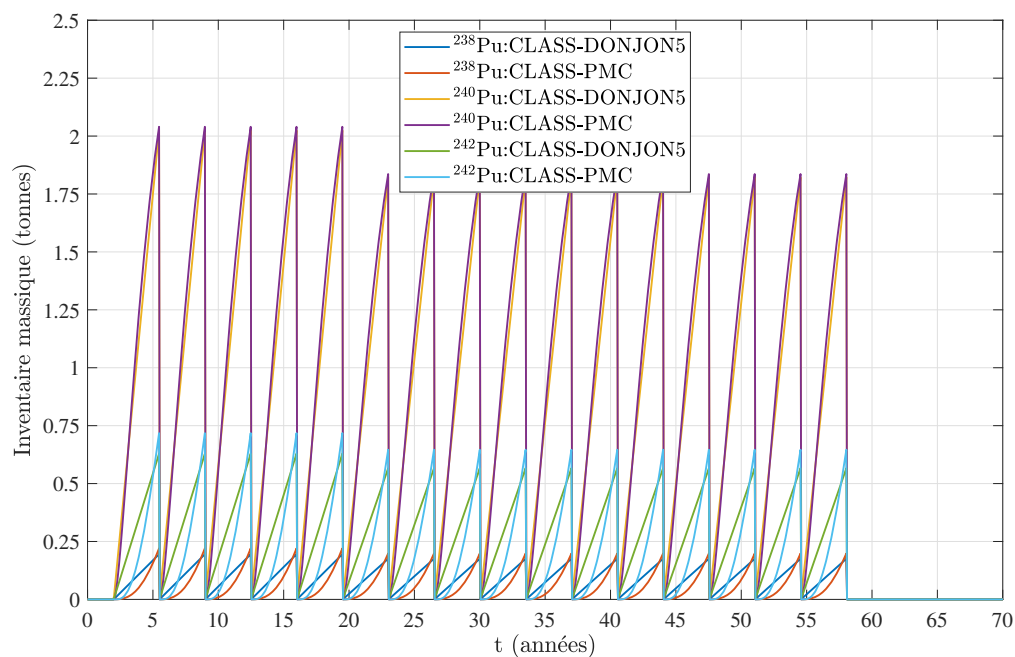


(a) Réacteurs UOx

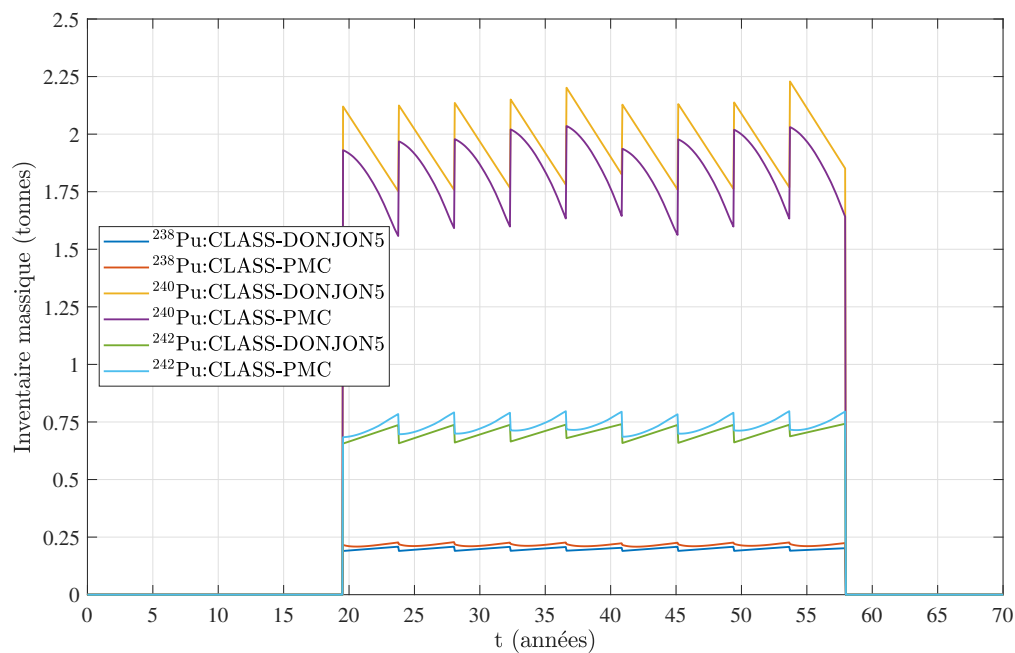


(b) Réacteurs MOx

Figure 7.16 Évolution des inventaires massiques en  $^{239}\text{Pu}$  et  $^{241}\text{Pu}$  dans les différents réacteurs (scénario C).



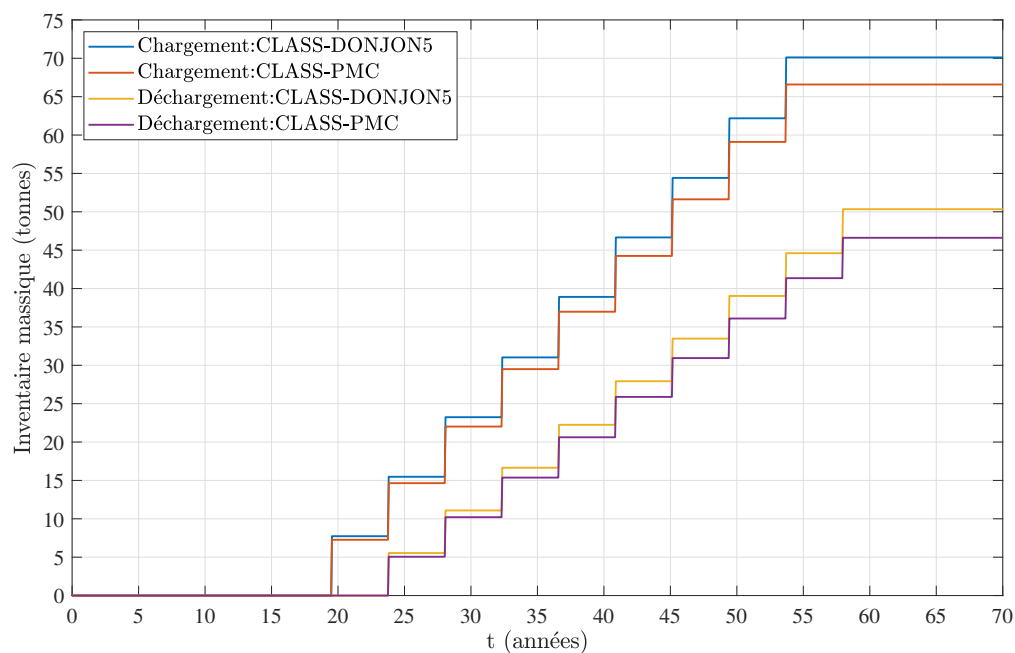
(a) Réacteurs UOx



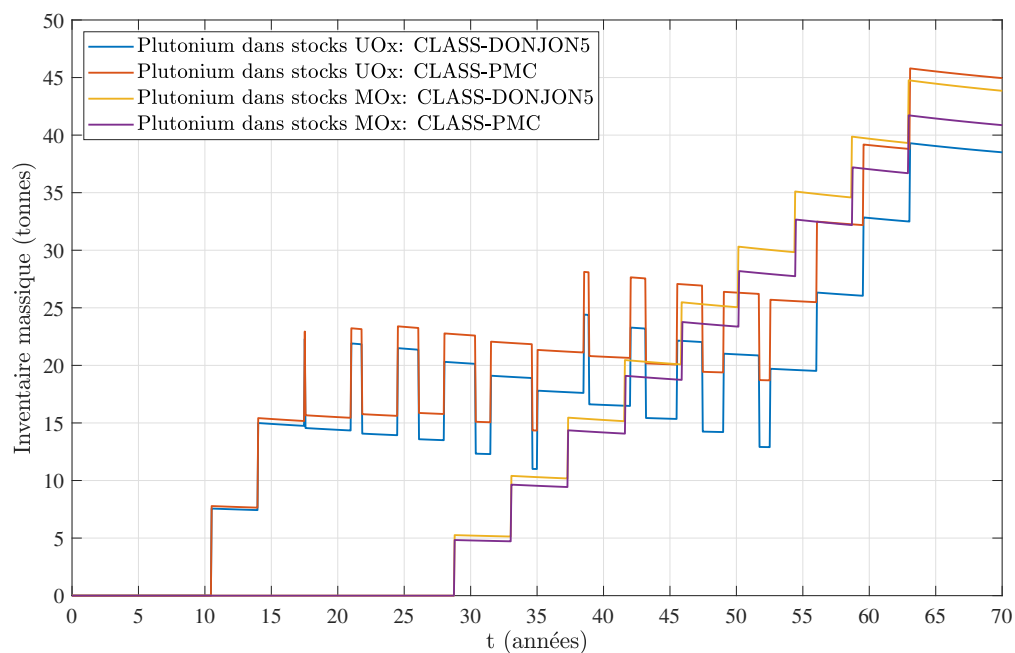
(b) Réacteurs MOx

Figure 7.17 Évolution des inventaires massiques en  $^{238}\text{Pu}$ ,  $^{240}\text{Pu}$  et  $^{242}\text{Pu}$  dans les différents réacteurs (scénario C).



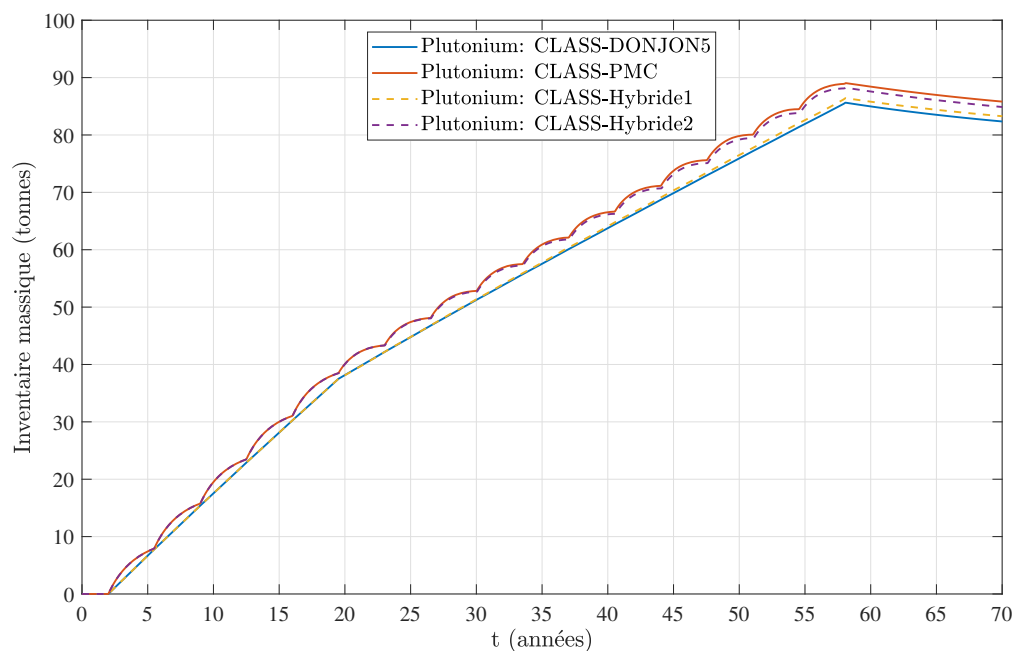


(a) Chargements et déchargements cumulés en plutonium dans les réacteurs MOx

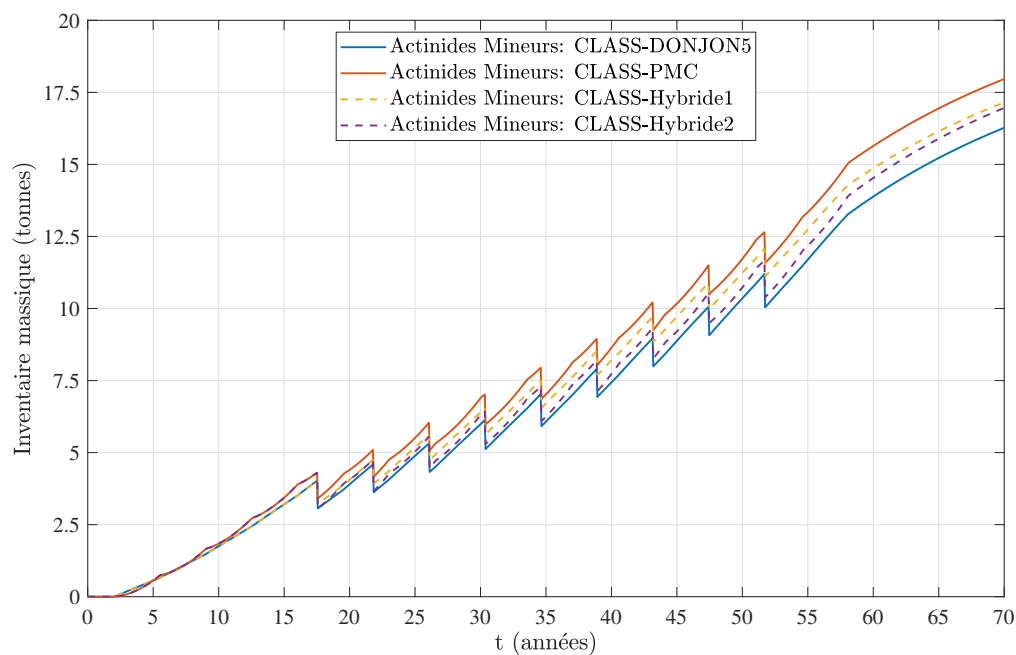


(b) Inventaires massiques en plutonium présents dans les stocks UOx et MOx

Figure 7.18 Inventaires cumulés chargés et déchargés dans les réacteurs MOx et présents dans les stocks UOx et MOx en plutonium (scénario C).



(a) Plutonium



(b) Actinides Mineurs

Figure 7.19 Inventaires massiques en plutonium et actinides mineurs au niveau du cycle (scénario C).

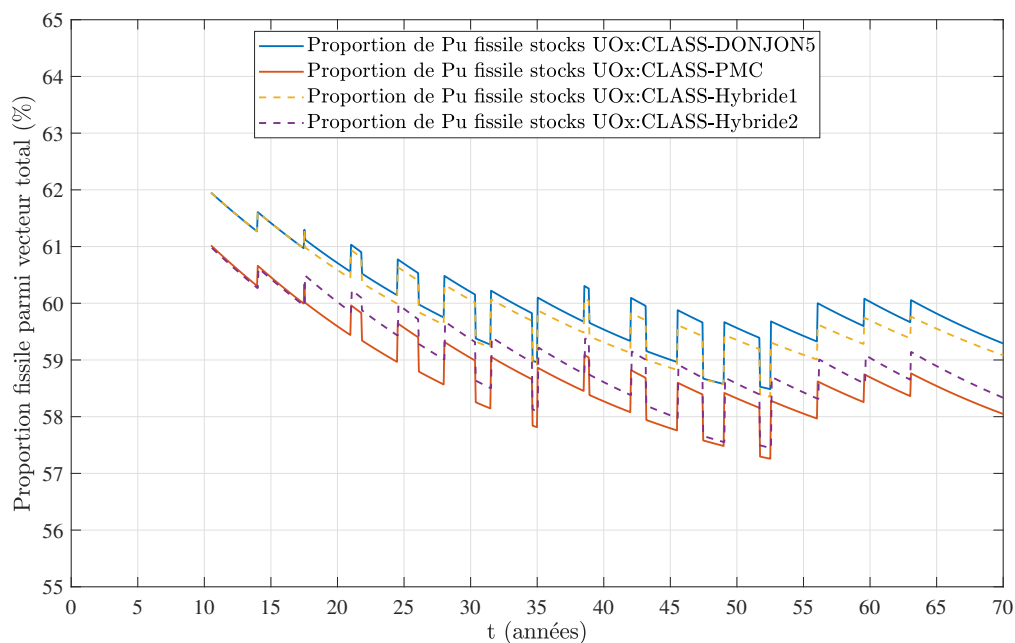


Figure 7.20 Qualité du plutonium disponible dans le combustible UOx déchargé et refroidi (scénario C).

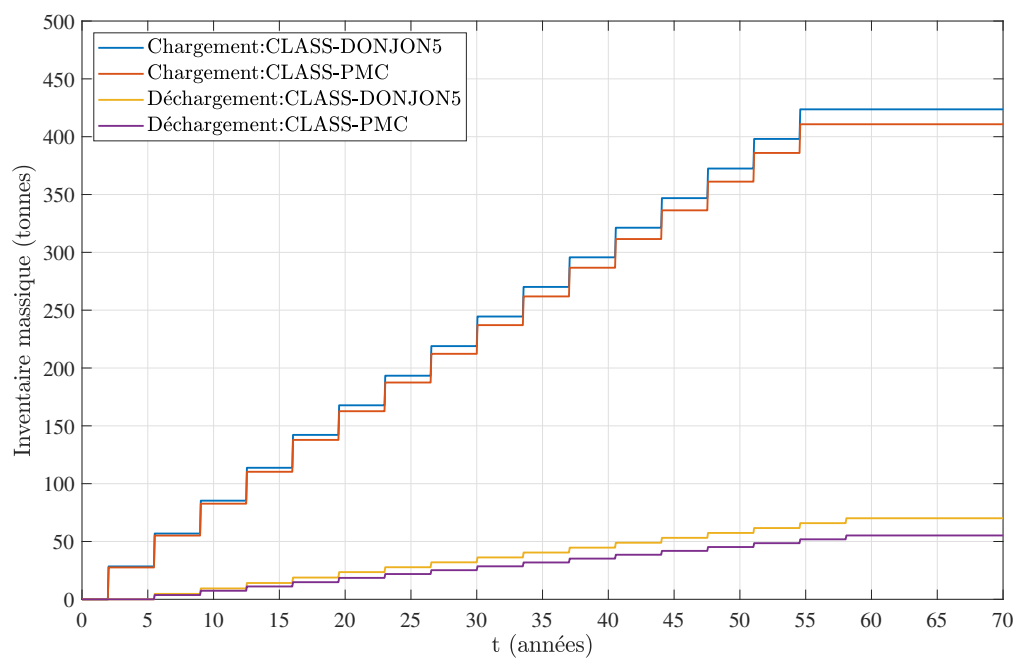


Figure 7.21 Inventaires cumulés chargés et déchargés en uranium 235 dans les réacteurs UOx (scénario C)

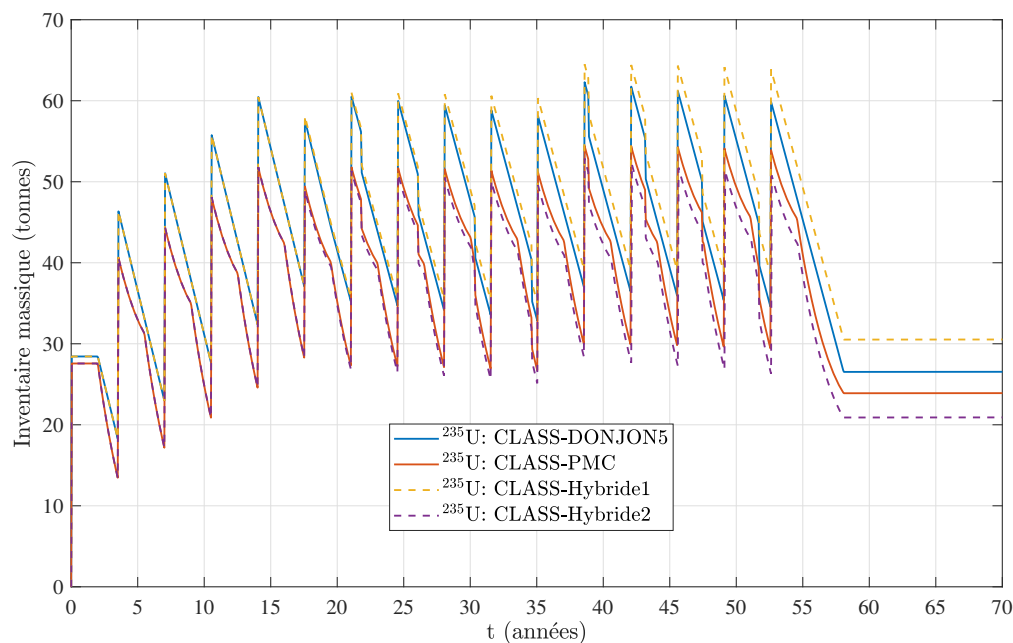


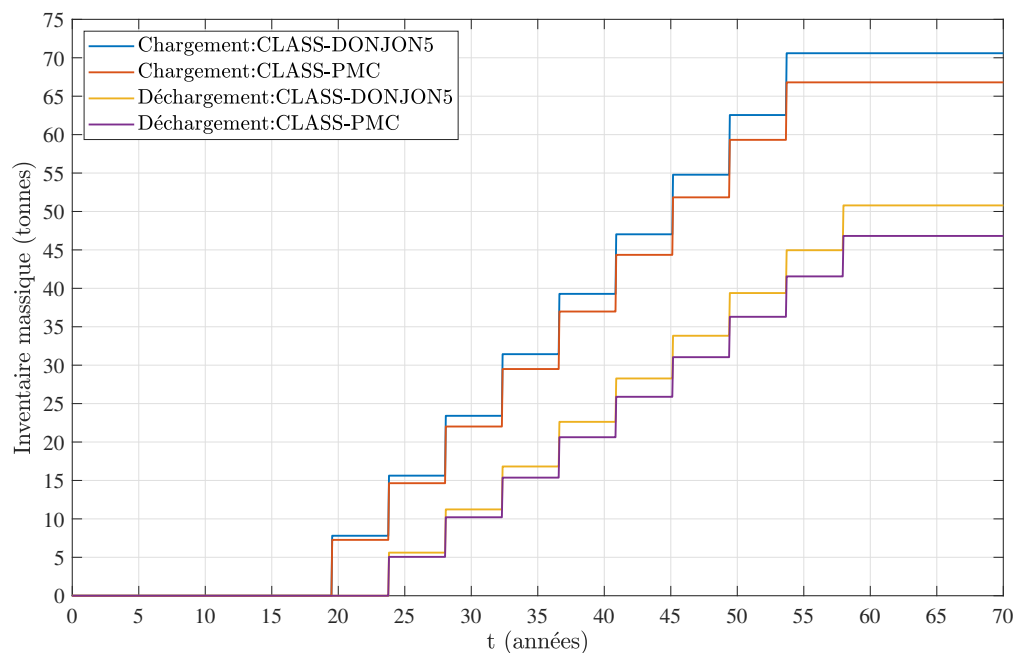
Figure 7.22 Inventaire en uranium 235 dans le cycle (scénario C)

#### 7.6.4 Scénario D.

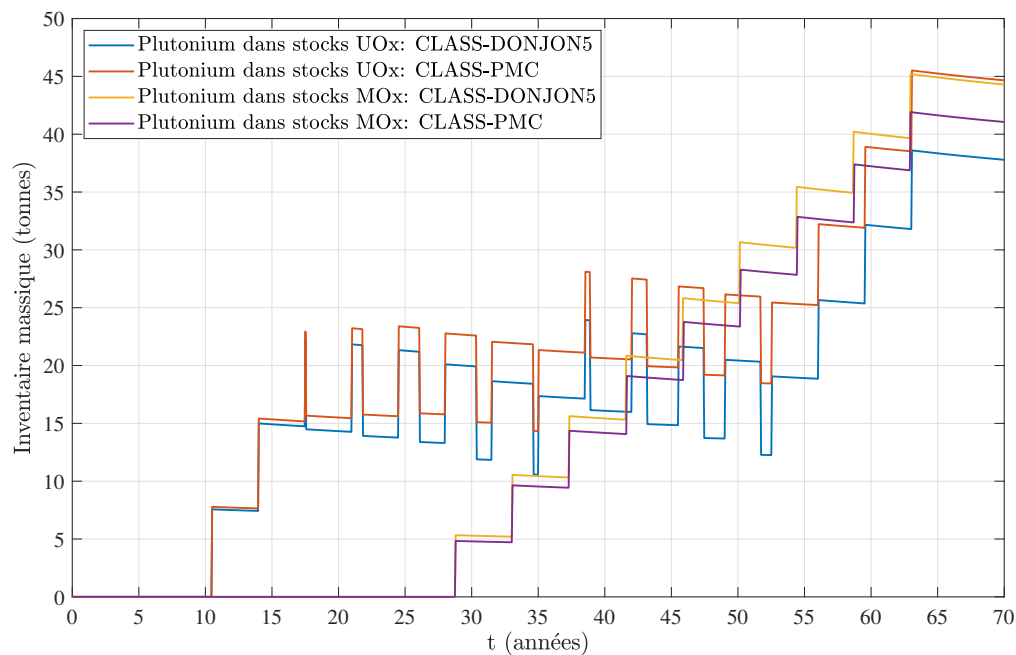
Le scénario D ne diffère du B que par la méthode de gestion des stocks. Contrairement à la comparaison des résultats des scénarios A et C, un effet, est constaté concernant les écarts par famille chimique en fin de scénario. Ces écarts, présentés au tableau 7.15 sont légèrement accentués tant pour les plutoniums que pour les actinides mineurs. La source de cette accentuation est à chercher du côté des réacteurs MOx. Ceci est visible sur les figures 7.23 et 7.24 et est pleinement cohérent puisque la gestion des stocks pour le retraitement n'influe pas les réacteurs UOx dont le combustible n'est pas issu d'un tel processus. L'évolution des déviations constatées s'explique comme cela avait été presupposé par des chargements moins riches en plutonium 241 ce qui induit moins d'actinides mineurs dans le cycle (500 kg de moins en fin de scénario quel que soit le procédé de calcul) comparé au scénario B.

Tableau 7.15 Écart relatif (%) sur les inventaires après 70 années pour le scénario D.

Cas	Plutonium	Actinides Mineurs
CLASS-DONJON5	référence	référence
CLASS-PMC	+4.5	+11.1
CLASS-Hybride1	+1.3	+6.1
CLASS-Hybride2	+3.1	+3.4

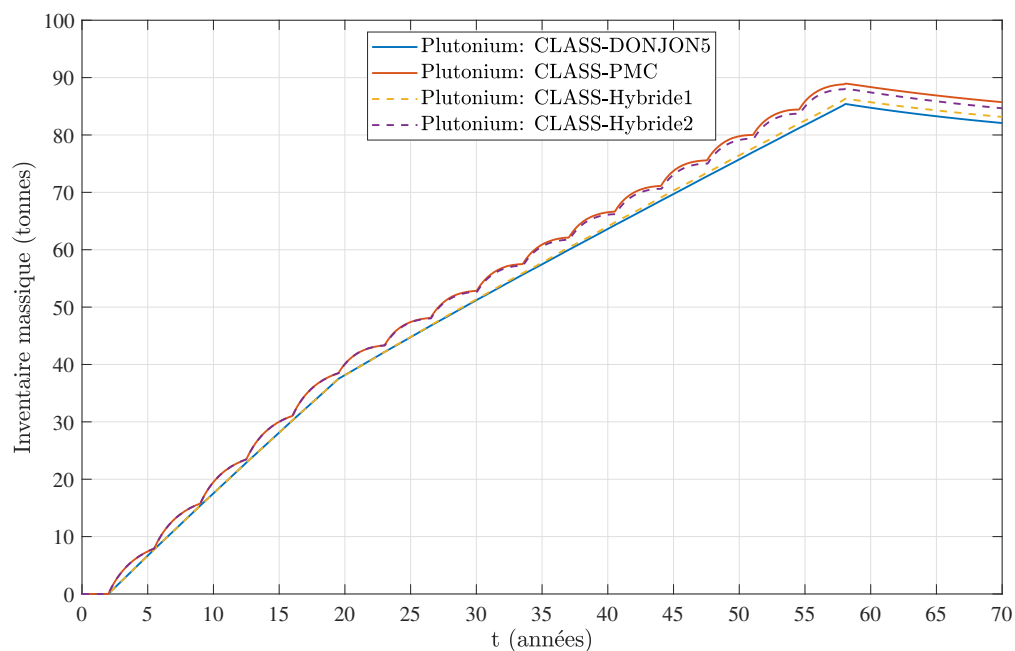


(a) Chargements et déchargements cumulés en plutonium dans les réacteurs MOx

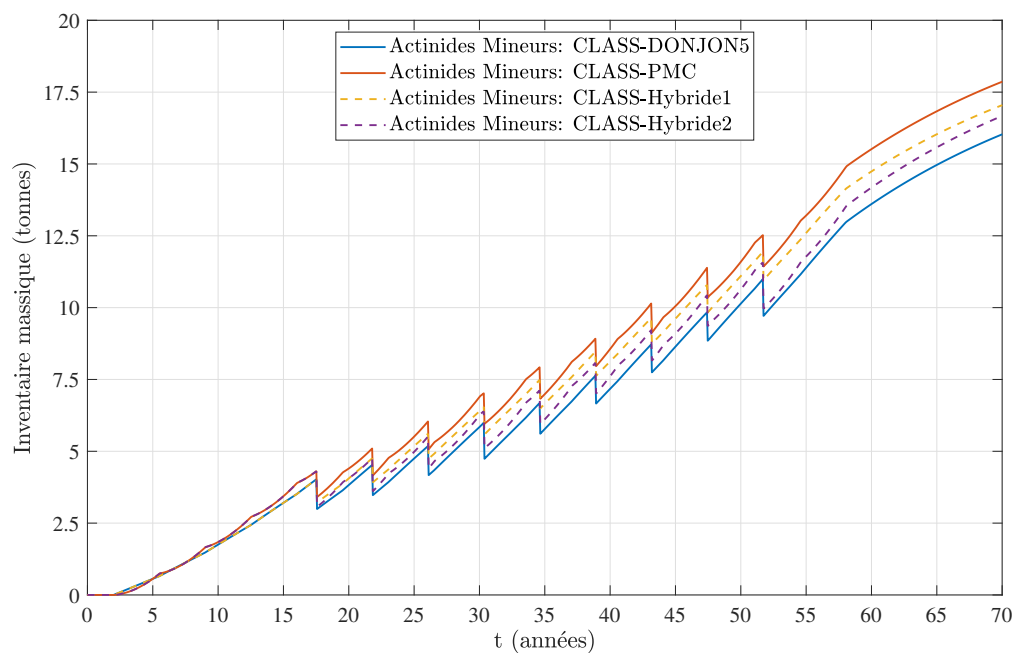


(b) Inventaires massiques en plutonium présents dans les stocks UOx et MOx

Figure 7.23 Inventaires cumulés chargés et déchargés dans les réacteurs MOx et présents dans les stocks UOx et MOx en plutonium (scénario D).



(a) Plutonium



(b) Actinides Mineurs

Figure 7.24 Inventaires massiques en plutonium et actinides mineurs au niveau du cycle (scénario D).

## CHAPITRE 8 CONCLUSION

### Synthèse

Ce projet permet de répondre à la plupart des questions initialement posées. Tout d’abord, il démontre la faisabilité d’un couplage effectif entre des calculs de cœur en diffusion DONJON5 et un code de scénario dynamique en exécution CLASS. Un modèle de cœur très simplifié est développé. De multiples optimisations sont réalisées afin de rendre celui-ci le plus rapide possible sans entacher la précision sur les résultats. La mise à l’équilibre est approchée par une méthode prédictive des burnups au chargement permettant de ne pas effectuer de cycles de mise à l’équilibre des réacteurs. Un calcul de cœur critique est effectué à chaque pas. Néanmoins, le nombre d’itérations permettant de déterminer la concentration de bore critique (et donc le temps de calcul) est considérablement réduit en considérant une variation linéaire de cette concentration après la chute de réactivité initiale. Dans le calcul de réseau fondé sur la géométrie très simplifiée ne faisant intervenir que les crayons de combustible, les gaines et le modérateur, de multiples optimisations permettent d’assurer des résultats similaires à ceux issus de code Monte-Carlo avec des temps d’exécution très raisonnables. Le calcul des bases de données pour le calcul en diffusion incluant les perturbations selon le burnup, l’isotopie (enrichissement en uranium 235 dans les UOx, enrichissement en plutonium ou proportion des plutoniums 238, 240, 241, 242 et américium 241 dans le MOx) et la concentration de bore dans le modérateur est réalisé. Différents échantillonnages sont testés (démontrant la possibilité d’effectuer des calculs de cœurs avec des bases de données de 4 Go) mais c’est finalement le plus léger qui est retenu puisqu’il est démontré qu’il engendre des coûts de calculs significativement inférieurs pour des déviations marginales sur les résultats. L’objet ainsi obtenu reste volumineux (100 Mo pour la base de données UOx et 2 Go pour celle du MOx) mais accessible à des ordinateurs de puissance moyenne. Parallèlement, le calcul des bases de données pour les réseaux de neurones incluant des centaines de calculs d’assemblage en évolution pour l’UOx et des milliers pour le MOx, est réalisé en un temps conséquent, mais raisonnable. Les prédicteurs de sections efficaces et de réactivité de type PMC sont créés sur des bases de données rigoureusement identiques et permettent une évaluation de l’impact des calculs de cœurs à l’échelle du scénario sans autre biais que la modélisation des réacteurs par des modèles appelant des calculs DONJON5 ou des réseaux de neurones.

Concernant l’utilisation des PMC dans CLASS pour les modèles de chargement et d’irradiation plusieurs constats sont effectués. La prédiction des inventaires des différentes familles d’éléments chimiques dévie des calculs couplés de 0 à 17 % en fin de scénario suivant les

situations et les éléments étudiés. Ces écarts sont très irréguliers entre les familles chimiques et au sein de ces dernières. La prédiction des inventaires en actinides mineurs est particulièrement mauvaise avec des déviations de 10 à 17 % en fin de scénario et peut atteindre plus de 40 % sur des isotopes comme l'américium 243 et le curium 244 au moment du déchargement. Comme cela a été expliqué, la désintégration des inventaires en plutonium 241 gomme, avec le temps, une partie de cet écart relatif en augmentant simplement la quantité totale en actinides mineurs par formation d'américium 241. La simulation pour les isotopes de l'uranium (hors uranium 238) conduit à des écarts de 0 à 15 %. Concernant le plutonium, les déviations sont plus limitées et comprises entre 3 et 5 %. Pour le plutonium de nombreuses compensations d'erreurs interviennent et poussent à tempérer le constat d'une relative bonne prédiction. Par exemple, notre étude des scénarios élémentaires montre que les réacteurs UOx surestiment les quantités de plutonium produites tandis que les réacteurs MOx sous-estiment la quantité de plutonium résiduelle. Des cas non étudiés pourraient très bien ne pas se révéler être si favorables que les situations présentées. Si une simple addition des erreurs à tous les niveaux était observée des déviations de l'ordre de 50 % sur les inventaires de certains isotopes seraient constatées. Pour le plutonium, la déviation à l'échelle de l'élément chimique cache également des écarts par isotopes nettement plus importants. Notons par exemple une déviation de 6 à 7 % sur le plutonium 239 dans le MOx et qui peut dépasser 15 % pour le plutonium 242 dans l'UOx.

Ces constats, sont à mettre en relation avec ceux effectués dans les travaux précédents [9] où les effets en termes de burnup maximal accessible et sur les inventaires entre des simulations d'assemblages de taille réelle avec des conditions de réflexion totales ou partielles ont été quantifiés. Les constats effectués d'un impact plus fort des fuites sur les isotopes uranium 235 et curium 244 sont pleinement partagés mais aucun effet particulier n'est noté pour le plutonium 240 pourtant également pointé. Globalement, les effets constatés dans le cadre de cette maîtrise sont plus importants ce qui est plutôt cohérent étant donné que dans notre cas, aux effets des fuites liés aux frontières physique de l'assemblage, se superposent des effets géométriques liés à l'échelle cœur et surtout des écarts de modélisation comme la définition du  $\tilde{k}_{\text{seuil}}$ .

La variable  $\tilde{k}_{\text{seuil}}$  s'avère être primordiale du point de vue des erreurs générées comme cela a pu être démontré tant dans les analyses mono-paramétriques que dans les scénarios élémentaires ou complexes. Cette variable est au centre du problème puisqu'elle contient l'information stratégique qu'est la pénalité neutronique liée à l'échelle cœur. Il est démontré que  $\tilde{k}_{\text{seuil}}$  doit impérativement être ajustée en fonction de l'isotopie (et non seulement de la nature combustible), du burnup de déchargement et de la concentration de bore utilisée dans les calculs de réseau. En l'absence d'une définition adéquate de  $\tilde{k}_{\text{seuil}}$  des écarts sur les inventaires au char-



gement allant jusqu'à 5 % dans les UOx et 15 % dans les MOx sont observés. Alors même que la précision des réseaux de neurones est très bonne et mène à des erreurs inférieures à 2 %, l'impact de paramètres comme l'irradiation non homogène des assemblages entre les cycles sur le  $\tilde{k}_{\text{seuil}}$  est en revanche prouvé comme secondaire et n'est pas à même d'engendrer des déviations de plus 5 % sur les inventaires. Enfin,  $\tilde{k}_{\text{seuil}}$  dépend probablement de la géométrie du cœur (qui influe les fuites neutroniques) mais ceci n'est pas étudié ici puisqu'une seule géométrie de cœur est conservée de bout en bout. Après  $\tilde{k}_{\text{seuil}}$ , la deuxième source d'erreur réside dans les modèles d'irradiation avec les réseaux de neurones. En effet, bien que ces derniers s'avèrent plutôt bons pour le MOx menant à des déviations de moins de 5 % sur les inventaires au déchargement pour des chargements identiques, il sont nettement moins performants avec des écarts supérieurs à 10 % pour l'uranium 235 ou le plutonium 242 dans l'UOx. À l'échelle des familles chimiques c'est toutefois l'effet du  $\tilde{k}_{\text{seuil}}$  qui domine nettement et ce d'autant plus que l'impact du modèle de chargement se transmet toujours au modèle d'irradiation tandis que l'inverse n'est vrai que dans le cas du combustible UOx recyclé.

## Perspectives

Face à ces divers constats, plusieurs correctifs et pistes de recherches peuvent être suggérés. Tout d'abord, comme cela a été évoqué une correction simple peut être appliquée en prenant en compte les curium 242, neptunium 238 et neptunium 239 dans les bases de données DONJON5. Ces actinides mineurs, bien que très minoritaires à l'échelle du cœur (quelques kilogrammes), impactent de manière importante les écarts mesurés sur certains isotopes comme le plutonium 238. Ceci permet, à peu de frais, de corriger une faible part de l'erreur observée.

Les scénarios hybrides étudiés dans cette étude ont consisté à employer un modèle d'équivalence et un modèle d'irradiation du même type (DONJON5 ou PMC) pour une catégorie de réacteur. Étant donné que le modèle de chargement est le plus générateur d'erreur, on peut également envisager d'employer uniquement les modèles d'équivalence DONJON5 et de conserver un modèle d'irradiation via les PMC. Cela aurait l'avantage de corriger la majorité de l'écart observé et de tenir compte de l'impact de l'isotopie et de la géométrie effective du cœur du combustible sur le burnup maximal atteignable. Cela corrigerait donc toutes les erreurs générées par la détermination arbitraire du  $\tilde{k}_{\text{seuil}}$ . De plus, le calcul pour le modèle d'équivalence DONJON5 est assez court (10-15 min pour les MOx et inférieures à 30 s pour les UOx par déchargement) contrairement au modèle d'irradiation (50 min pour le MOx et 3 min pour l'UOx) cela permettrait donc d'allier un gain de précision important et une augmentation des temps d'exécution raisonnable.

Une autre option consisterait à déployer à l'échelle de milliers de calculs la procédure détaillée

en 7.1 permettant de calculer un  $\tilde{k}_{\text{seuil}}$  avec un chaînage entre un calcul de cœur DONJON5 et un calcul de réseau DRAGON5. Concrètement il s'agit d'effectuer des milliers de calculs avec le modèle d'équivalence DONJON5, de stocker les valeurs d'enrichissements ainsi obtenues et d'effectuer des calculs de réseau pour les assemblages correspondants ce qui permet de déterminer les  $\tilde{k}_{\text{seuil}}$ . Disposant de cette base de données de vecteurs isotopiques en correspondance avec des  $\tilde{k}_{\text{seuil}}$ , il devient possible de créer un nouveau réseau de neurones dédié à la prédiction de ce paramètre.

Enfin, ce projet demande à être complété si l'ambition est de construire des modèles de réacteurs réalistes pour le code de scénario. La géométrie des assemblages pour le calcul de réseau devrait intégrer les tubes guides, les éléments de structure (grilles) et les éléments de contrôle de la réactivité insérés dans le cœur. La simulation de réacteurs plus réalistes contenant par exemple 30 % d'assemblages MOx et 70 % d'UOx est également souhaitable. Celle-ci pose une multitude de questions concernant les plans de chargement, la manière de gérer le double approvisionnement des réacteurs dans le scénario, l'appel à deux bases de données pour un même chargement, etc. Néanmoins, il est absolument évident que vérifier la validité des constats ici effectués dans une telle situation plus réaliste est le prolongement logique de l'étude qui a été menée sur des réacteurs homogènes et pour cette géométrie d'assemblage très simplifiée.

## RÉFÉRENCES

- [1] A. Yacout, R. Hill, L. Van Den Durpel, P. Finck, E. Schneider, C. Bathke et J. Herring, “Dynamic analysis of the AFCI scenarios,” *PHYSOR 2004*, p. 25–29, 2004.
- [2] E. A. Schneider, C. G. Bathke et M. R. James, “NFCSim : A dynamic fuel burnup and fuel cycle simulation tool,” *Nuclear technology*, vol. 151, n<sup>o</sup>. 1, p. 35–50, 2005.
- [3] C. Coquelet-Pascal, M. Tiphine, G. Krivtchik, D. Freynet, R. Girieud et R. Eschbach, “COSI6 : a tool for nuclear transition scenarios studies,” *Proc. of Global 2015*, 2015.
- [4] K. D. Huff, M. J. Gidden, R. W. Carlsen, R. R. Flanagan, M. B. McGarry, A. C. Opotowsky, E. A. Schneider, A. M. Scopatz et P. P. Wilson, “Fundamental concepts in the Cyclus nuclear fuel cycle simulation framework,” *Advances in Engineering Software*, vol. 94, p. 46–59, 2016.
- [5] B. Mouginot, B. Leniau, N. Thiollere, M. Ernoult, S. David, X. Doligez, A. Bidaud, O. Meplan, R. Montesanto, G. Bellot *et al.*, “Core library for advanced scenario simulation, CLASS : principle & application,” dans *International Conference “The Role of Reactor Physics toward a Sustainable Future”(PHYSOR 2014)*, 2014, p. 12–p.
- [6] C. Bodin, “Analyse de l’impact de l’environnement dans un schéma de calcul à deux étapes avec DRAGON et DONJON,” Mémoire de maîtrise, École Polytechnique de Montréal, 2010.
- [7] G. Marleau, A. Hébert et R. Roy, “A User Guide for DRAGON Version 5,” *Institut de génie nucléaire, Département de génie physique, École Polytechnique de Montréal. Montréal QC, Canada, Tech. Rep. IGE-335*, 2018.
- [8] A. Hébert, D. Sekki et R. Chambon, “A User Guide for DONJON Version 5,” *Institut de génie nucléaire, Département de génie mécanique, École Polytechnique de Montréal. Montréal QC, Canada, Tech. Rep. IGE-344*, 2019.
- [9] A. Somaini, S. David, X. Doligez, A. Zakari-Issoufou, A. Bidaud, N. Cappelan, O. Méplan, A. Nuttin, P. Prévot, F. Courtin *et al.*, “The impact of reactor model simplification for fuel evolution : A bias quantification for fuel cycle dynamic simulations,” dans *2016 International Congress on Advances in Nuclear Power Plants (ICAPP 2016)*, 2016, p. 1045–1053.
- [10] C. Coquelet-Pascal et C. Kieffer, “Validation of physical models used in scenarios studies by coupling COSI with ERANOS package,” dans *Proc. of GLOBAL*, 2011.

- [11] B. Mouginot, B. Leniau, N. Thiollie, A. Bidaud, F. Courtin, X. Doligez et M. Ernoult, “MOX fuel enrichment prediction in PWR using polynomial models,” *Annals of Nuclear Energy*, vol. 85, p. 812–819, 2015.
- [12] B. Leniau, B. Mouginot, N. Thiollie, X. Doligez, A. Bidaud, F. Courtin, M. Ernoult et S. David, “A neural network approach for burn-up calculation and its application to the dynamic fuel cycle code CLASS,” *Annals of Nuclear Energy*, vol. 81, p. 125–133, 2015.
- [13] F. Rosenblatt, “Principles of neurodynamics. perceptrons and the theory of brain mechanisms,” Cornell Aeronautical Lab. Inc, Buffalo, NY, Rapport technique, 1961.
- [14] A. Hoecker, P. Speckmayer, J. Stelzer, J. Therhaag, E. von Toerne et H. Voss, “TMVA : Toolkit for multivariate data analysis, pos, vol,” *ACAT, S*, vol. 40, 2007.
- [15] P. Reuss, *Précis de neutronique*. EDP sciences, 2012.
- [16] A. Nuttin, P. Guillemin, A. Bidaud, N. Capellan, R. Chambon, S. David, O. Méplan et J. Wilson, “Comparative analysis of high conversion achievable in thorium-fueled slightly modified CANDU and PWR reactors,” *Annals of Nuclear Energy*, vol. 40, n°. 1, p. 171–189, 2012.
- [17] A. Worrall, “Effect of plutonium vector on core wide nuclear design parameters,” IAEA, Rapport technique, 2000.
- [18] H. R. Trellue, “Neutronic and logistic proposal for transmutation of plutonium from spent nuclear fuel as mixed-oxide fuel in existing light water reactors,” *Nuclear technology*, vol. 147, n°. 2, p. 171–180, 2004.
- [19] A. Hébert, *Applied reactor physics*. Presses inter Polytechnique, 2009.
- [20] G. Marleau, “New geometries processing in DRAGON : the NXT : module,” *Report IGE-260, Institut de Génie Nucléaire, École Polytechnique de Montréal, Montréal*, 2006.
- [21] I. Petrovic, P. Benoist et G. Marleau, “A quasi-isotropic reflecting boundary condition for the TIBERE heterogeneous leakage model,” *Nuclear science and engineering*, vol. 122, n°. 2, p. 151–166, 1996.
- [22] O. Méplan, A. Nuttin, O. Laulan, S. David, F. Michel-Sendis et J. Wilson, “MURE : MCNP utility for reactor evolution-description of the methods, first applications and results,” dans *ENC 2005-European Nuclear Conference. Nuclear Power for the XXIst Century : From basic research to high-tech industry*. European Nuclear Society, 2005, p. 1–7.
- [23] A. Santamarina, C. Collignon et C. Garat, “French calculation schemes for light water reactor analysis,” *The Physics of Fuel Cycles and Advanced Nuclear Systems : Global Developments (PHYSOR 2004)*, 2004.

- [24] R. Nithyadevi, L. Thilagam, R. Karthikeyan et U. Pal, “Analysis of neutronics benchmarks for the utilization of mixed oxide fuel in light water reactor using DRAGON code,” *Annals of Nuclear Energy*, vol. 94, p. 643–654, 2016.
- [25] H. Leroyer, “Calculs d’assemblages de REP en environnement,” Mémoire de maîtrise, École Polytechnique de Montréal, 2009.
- [26] J. Leppänen, “Serpent—a continuous-energy monte carlo reactor physics burnup calculation code,” *VTT Technical Research Centre of Finland*, vol. 4, 2013.
- [27] A. Hébert, “A nuclear data library production system for advanced lattice codes,” dans *International Conference on Nuclear Data for Science and Technology*. EDP Sciences, 2007, p. 701–704.
- [28] N. Hfaiedh, “Nouvelle méthodologie de calcul de l’absorption résonnante,” Thèse de doctorat, Université Louis Pasteur (Strasbourg), 2006.
- [29] N. Bejaoui, “Simulation numérique de l’effet du réflecteur radial sur les cellules REP en utilisant les codes DRAGON et DONJON,” Mémoire de maîtrise, École Polytechnique de Montréal, 2012.
- [30] A. Hébert et D. Sekki, “A user guide for TRIVAC version4,” *Institut de Génie Nucléaire, Tech. Rep. IGE-293*, 2010.
- [31] A. Hébert, “Revisiting the Ceschino Interpolation Method, in MATLAB – a Ubiquitous Tool for the Practical Engineer,” *Edited by Clara M. Ionescu*, p. 23, 2011.
- [32] V. Salino et A. Hébert, “On steady-state multiphysics stability and related in-core fuel management capabilities in DONJON5,” dans *PHYSOR 2016, Sun Valley, ID, USA*, 2016.
- [33] H. R. Trellue, “Safety and neutronics : A comparison of MOX vs UO<sub>2</sub> fuel,” *Progress in Nuclear Energy*, vol. 48, n<sup>o</sup>. 2, p. 135–145, 2006.
- [34] A. Hébert et R. Roy, “The GANLIB version 5 developer’s guide,” *Rapport IGE313, Polytechnique de Montréal*, 2019.
- [35] G. Youinou et G. B. G. R. Puill, A., “Plutonium management and multirecycling in PWRs using the enriched uranium support,” *Proceedings of the International Conference on Future Nuclear Systems*, 1999.
- [36] J. Barral, J. Provost *et al.*, “Trente ans de combustible REP à EDF : fiabilité et retour d’expérience, évolution des performances et des gestions au service du parc nucléaire,” *Revue générale nucléaire*, n<sup>o</sup>. 2, p. 44–51, 2008.
- [37] X. Doligez, S. Bouneau, S. David, M. Ernoul, A.-A. Zakari-Issoufou, N. Thiollière, A. Bidaud, O. Méplan, A. Nuttin et N. Capellan, “Fundamentals of reactor physics with

- a view to the (possible) futures of nuclear energy,” *Comptes Rendus Physique*, vol. 18, n°. 7-8, p. 372–380, 2017.
- [38] M. D. McKay, R. J. Beckman et W. J. Conover, “A comparison of three methods for selecting values of input variables in the analysis of output from a computer code,” *Technometrics*, vol. 42, n°. 1, p. 55–61, 2000.
- [39] H. Safa, “La technologie électronucléaire en France aujourd’hui,” *Reflets de la physique*, n°. 60, p. 8–12, 2018.

## ANNEXE A    IMPACT DE LA PRISE EN COMPTE DES TUBES GUIDES DANS LE CALCUL DE RÉSEAU

L'objet de cette annexe est d'évaluer l'impact sur le calcul de réseau de la non prise en compte des tubes guides dans le modèle d'assemblage utilisé à l'institut de physique nucléaire d'Orsay.

Sur les graphiques des figures A.1 et A.2 on constate que les évolutions des réactivités et des inventaires isotopiques pour les combustibles UOx et MOx avec prise en compte des tubes guides sont presque identiques à celles qui sont représentées sur les figures 4.14 et 4.15 qui représentent ces mêmes grandeurs dans le cas du modèle d'assemblage ultra simplifié ne comportant que des trous d'eau. En particulier, les différences observées sur les équilibres des différents isotopes du plutonium en fonction de l'enrichissement des combustibles UOx ou de l'isotopie du vecteur plutonium des MOx sont similaires.

Néanmoins, les graphiques de la figure A.3 montrent que les déviations relatives associées à la modélisation de l'assemblage par le modérateur, les crayons de combustibles et les gaines uniquement engendrent des écarts relatifs conséquents. Des déviations de l'ordre de 1 à 3 % sont notées sur les inventaires et de -300 à +500 pcm sur la réactivité. Ces dernières s'expliquent par une légère sur modération dans le cas du modèle simplifié où les tubes guides en zircaloy 4 sont remplacés par du modérateur mais aussi par une diminution des captures neutroniques (plus importantes dans le zircaloy que dans l'eau légère). Il en résulte un gain en réactivité et une baisse du flux neutronique. Les inventaires des isotopes d'intérêt s'affichent eux tous inférieurs comparativement à ceux déterminés dans le calcul avec les tubes guides. En effet, les isotopes présents initialement et fissiles disparaissent plus rapidement (car il y a plus de modération) tandis que les isotopes formés par capture sont moins présents en fin de cycle en raison d'un flux neutronique plus faible.

Finalement, on constate que l'ensemble des phénomènes physiques d'intérêt est conservé dans les bases de données fondées sur le modèle ultra simplifié. Si l'objectif est de constituer un modèle d'assemblage proche de la réalité, la prise en compte des tubes guides (mais pas seulement) apparaît nécessaire. Pour autant, dans le cadre de notre étude, ce modèle suffit à assurer la validité des interprétations sur l'impact des calculs de cœurs vis-à-vis du traitement de bases de données identiques par des réseaux de neurones.

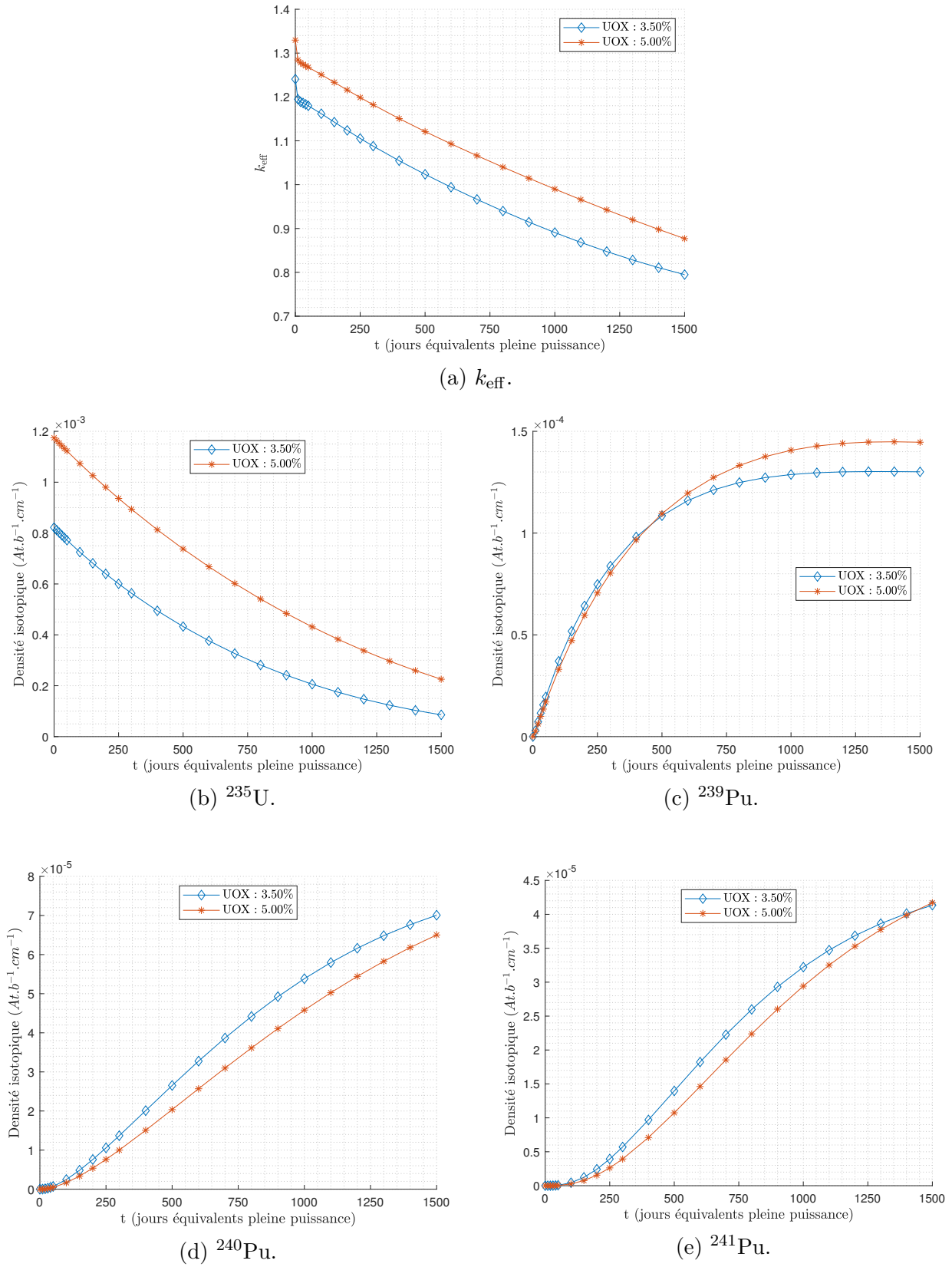


Figure A.1 Résultats des calculs d'assemblage pour deux combustibles UOx avec prise en compte des tubes guides.



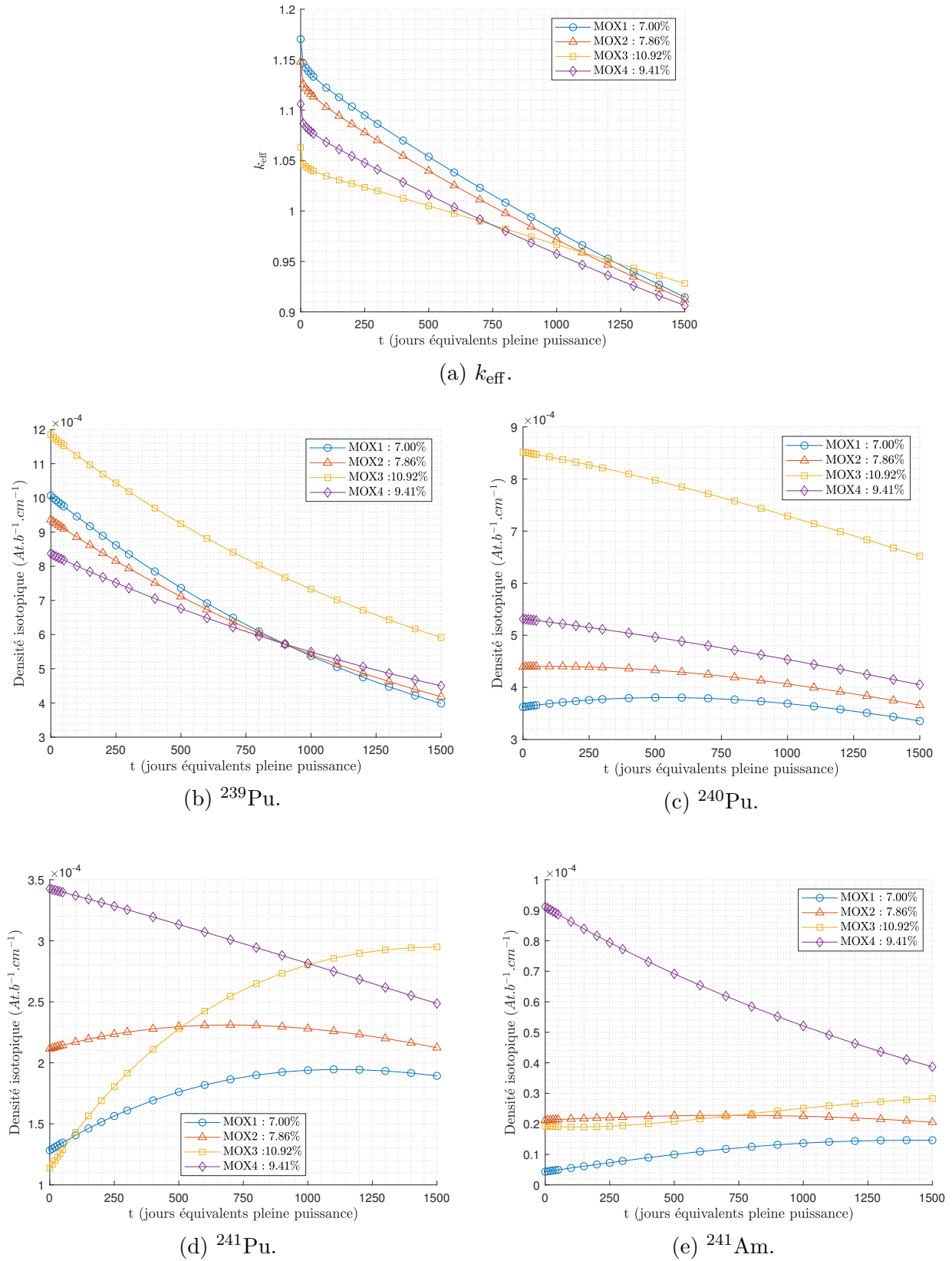


Figure A.2 Résultats des calculs d'assemblage pour les combustibles MOx avec prise en compte des tubes guides.

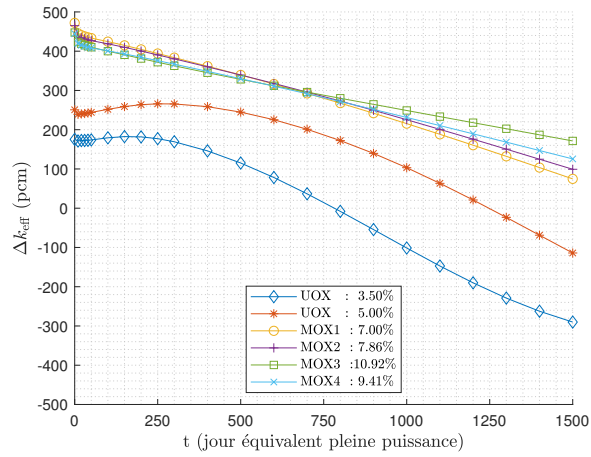
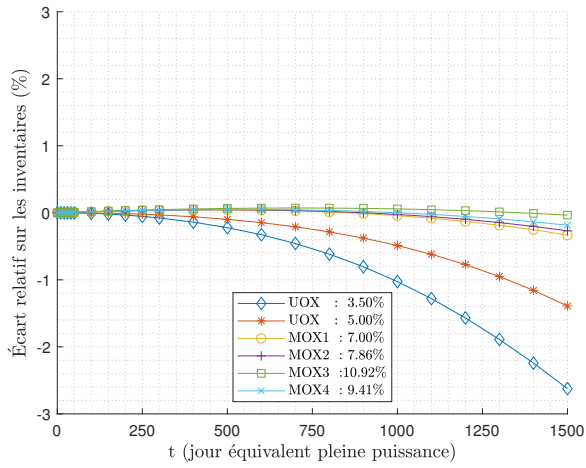
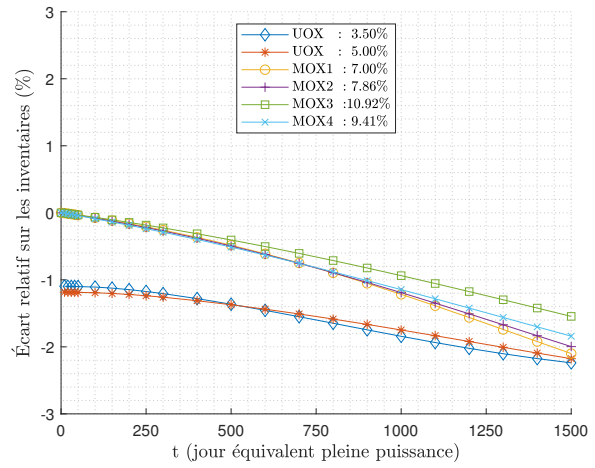
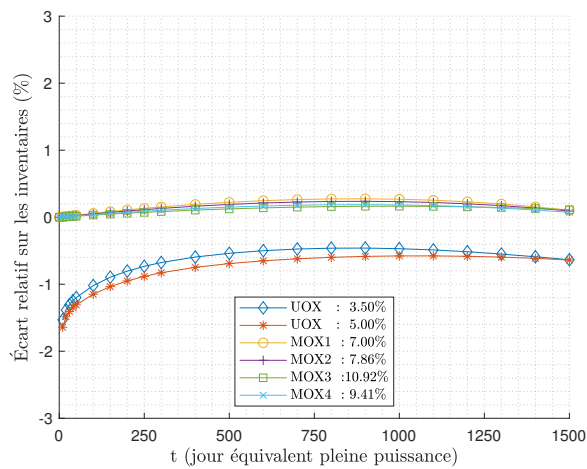
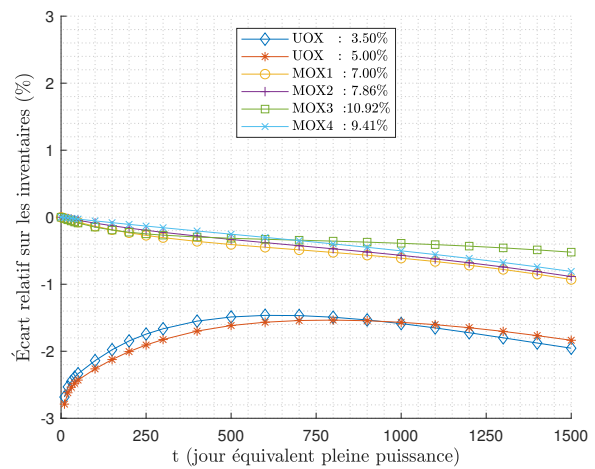
(a)  $k_{\text{eff}}$ .(b)  $^{235}\text{U}$ .(c)  $^{239}\text{Pu}$ .(d)  $^{240}\text{Pu}$ .(e)  $^{241}\text{Pu}$ .

Figure A.3 Comparaison entre des calculs d'assemblage avec prise en compte des tubes guides et le modèle ne comportant que des trous d'eau.